

جامعة قاصدي مرباح ورقلة
كلية الرياضيات وعلوم المادة
قسم الفيزياء



مذكرة

ماستر أكاديمي

مجال: علوم المادة

فرع: فيزياء

تخصص : فيزياء الإشعاعات، كاشف وبصريات إلكترونية

من إعداد : بالمهدي مفيدة

بعنوان:

حساب احتمالات التفاعل خلال توضع طبقة جرافين على سطح Cu بطريقة PECVD

نوقشت يوم: 25 / 05 / 2017

أمام لجنة المناقشة المكونة من:

رئيسا	جامعة ورقلة	أستاذ محاضر أ	د. محمدي لزهري
ممتحنا	جامعة ورقلة	أستاذ مساعد أ	أ.بلة زكية
مشرفا	جامعة ورقلة	أستاذ محاضر أ	د.باباحني أم الخير

الموسم الجامعي: 2016/2017

الإهداء

بسم الله الرحمن الرحيم

أهدي ثمرة جهدي الى من قال عز وجل

" وقضى ربك ألا تعبدوا إلا اياه وبالوالدين احسانا "

الى من علمتني وعلمت الصعاب لأكل الى ما أنا فيه

الى الشمعة التي أذارت طريقتي....الى روضة العجب التي تنبت أزكى الأزهار

أمي

والى من ضحى براحته من أجل راحتى

أبي

الى من شاركوني حزن الأم وبهم أستمد عزتي وإصراري

الى من هم اقرب إلي من روجي

إخوتي و أخواني

الى من ساندتني في هذا العمل....و وجهتني إلى النجاح

أستاذتي

الى كل فرد دفعة 2017 دون إستثناء....الى كل هؤلاء....أهدي ثمرة جهدي

المتواضع.

شكر و تقدير

الحمد لله رب العالمين الحمد لله الذي هدانا لهذا وما كنا لنهتدي لولا أن هدانا الله، والشكر لله والصلاة والسلام على رسول الله.

أتقدم أولا واخرا بالشكر لله عز وجل الذي بنعمته تتم الصالحات، فله الحمد حتى يرضى وله الحمد اذا رضى وله الحمد بعد الرضا.

أتشرفه أن أتقدم بشكري الخالص إلى كل من ساعدني في إعداد هذه المذكرة و بالأخص الذكر: الدكتورة المشرفة "بابا حني أم الخير" أتقدم لها بخالص الشكر والتقدير على قبولها الإشراف و اقتراحها لي هذا الموضوع، وعلى التشجيع الدائم وجميل الصبر في هذا المنشوار، وما بذلته من جهد ومتابعة لمدة الإشراف، كما أشكر البروفيسور "خلفاوي فتحي"، وأشكر أيضا الأستاذ الكريم "محمدي لزه" لقبوله تروس لجنة المناقشة، كما أشكر الأستاذة المحترمة "بلّة زكية" لقبولها مناقشة هذه المذكرة وأتمنى أن يفيدوني بأرائهم القيمة والبناءة.

كما أشكر كل أعضاء فريق البحث بمخبر الأشعاع والبلازما وفيزياء السطوح بقسم الفيزياء بجامعة قاصدي مرباح ورقلة.

فلا يغيب عن خاطري إلا أن أتقدم بالشكر الجزيل الى أنسى الذكر "نور، سعيدة، إيمان ، نعيمة .

فهرس المحتويات

أ	فهرس المحتويات
ت	فهرس الجداول
ت	فهرس الأشكال
1	المقدمة العامة
	الفصل الأول : عموميات حول الطبقات الرقيقة و الجرافين
2	I.المقدمة
2	I.1. الطبقات الرقيقة (les couches minces)
3	I.2. الطرق العامة لتوضع الطبقات الرقيقة
3	I.1.2. الترسيب الفيزيائي للبخار (PVD) Dépôt Physique en Phase Vapeur
4	I.2.2. الترسيب الكيميائي للبخار (CVD) Chemical Vapor Déposition
5	I.3. أنواع الترسيبات الكيميائية للطور البخاري
5	I.4. تقنية النمو بطريقة الترسيب الكيميائي للبخار CVD
6	I.5. الظواهر الفيزيائية الحادثة أثناء توضع ونمو طبقة بواسطة الترسيب الكيميائي للبخار
6	I.1.5. ظاهرة الامتزاز (Adsorption)
6	I.1.1.5. الامتزاز الكيميائي (Adsorption chimique)
7	I.2.1.5. الامتزاز الفيزيائي (Adsorption Physique)
7	I.2.5. ظاهرة الانتزاز (Désorption)
8	I.6. الجرافين (Graphène)
9	I.1.6. بنية الجرافين
9	I.1.1.6. البنية البلورية
9	I.2.1.6. البنية الالكترونية
10	I.2.6. تقنيات انتاج الجرافين
10	I.1.2.6. تقنية الترسيب الكيميائي للطور البخاري (Chemical vapor Deposition)
11	I.2.2.6. تقنية التقشير الميكروميكانيكية (Exfoliation micromecanique)
12	I.3.2.6. فتح الانابيب النانوكربونية (Ouverture de nanotubes de carbon)
12	I.4.2.6. نمو الجرافين على طبقة السيلكون (Croissance Graphène sur Silicon)

12	5.2.6.I. تحول أكسيد الجرافين (Réduction d'oxyde de Graphène)
13	3.6. I. مميزات الجرافين
14	4.6. I. استخدامات الجرافين
14	7.I. انتاج ونمو الجرافين بتقنية PECVD على طبقة من النحاس باستعمال الخليط الغازي (CH_4 / H_2)
15	1.7.I. تقنية PECVD
15	2.7.I. إيجابيات تقنية PECVD
16	8. I. تركيب الجرافين CVD
18	9. I. احتمالات التفاعل على السطح
18	10. I. كمون التفاعل بين الجزيئات و السطح
19	1.10. I. كمونات التفاعل
21	11. I. محاكاة مونت كارلو
22	1.11. I. مبدأ محاكاة مونت كارلو
22	2.11. I. مميزات محاكاة مونت كارلو
23	3.11. I. قيود المحاكاة
	الفصل الثاني : النمذجة العددية
24	II. المقدمة
24	1.II. الظاهرة الفيزيائية
25	3.II. بعض التفاعل التفاعلات الكيميائية على السطح
25	4.II. كمون تفاعل الجذر- السطح
26	5.II. احتمالية التفاعل على الموقع SRP واحتمالية التفاعل على السطح SFRP
28	6.II. مخطط لحساب كمونات التفاعل للجذور:
29	7.II. مخطط لحساب نسبة التفاعل على الموقع باستعمال محاكاة مونت كارلو
	الفصل الثالث : المناقشة وتحليل النتائج
30	III. 1. المقدمة
30	III. 2. احتمال تفاعل الجذر النشط على الموقع خلال توضع الجرافين بطريقة PECVD
31	III. 3. حساب احتمال التفاعل على الموقع للجذور C_yH_x باستعمال احتمال محاكاة مونت كارلو والنموذج النظري
31	III. 1.3. احتمال التفاعل على الموقع بالنسبة للجذر CH_3
32	III. 2.3. احتمال التفاعل على الموقع بالنسبة للجذر CH_2
33	III. 3.3. احتمال التفاعل على الموقع بالنسبة للجذر CH

34	4.3.III احتمال التفاعل على الموقع بالنسبة للجذر H
35	4.III نتائج الاحتمال على السطح للجذور β, γ, s

فهرس الجداول

	الفصل الأول : عموميات حول الطبقات الرقيقة و الجرافين
7	الجدول 1.I: الأليات الأساسية للتوضع
	الفصل الثالث : تحليل ومناقشة النتائج
30	III 1. : قيم طاقات التنشيط للجذور
35	III 2. : قيم احتمالات التفاعل على الموقع و على السطح بالنسبة للجذر CH_3
37	III 3. : قيم احتمالات التفاعل على الموقع و على السطح بالنسبة للجذر CH_2

فهرس الأشكال

	الفصل الأول : عموميات حول الطبقات الرقيقة و الجرافين
3	الشكل 1.I : تقنيات ترسب الطبقات الرقيقة
3	الشكل 2.I : المبدأ الأساسي لتبخر
4	الشكل 3. I : مبدأ الترسيب الكيميائي لطور البخاري CVD
6	الشكل 4.I : خطوات الترسيب الكيميائي للبخار
8	الشكل 5.I : بنية الجرافين
9	الشكل 6.I : أبعاد خلية الجرافين
10	الشكل 7.I : البنية الالكترونية للجرافين
11	الشكل 8.I : الفلورين ، الأنابيب النانوكربونية ، الجرافين ، الجرافيت
11	الشكل 9.I : تقنية التقشير المايكرو ميكانيكية
12	الشكل 10.I : تشكل الجرافين من الأنابيب النانوكربونية
12	الشكل 11.I : تشكل الجرافين على طبقة السيلكون
13	الشكل 12.I : تحول الأكسيد الى جرافين
15	الشكل 13.I : مفاعل PECVD لإنتاج الطبقات الرقيقة
17	الشكل 14.I : تشكل الجرافين على النحاس
	الفصل الثاني : النمذجة العددية

26	الشكل 1.II : كمون التفاعل (9.3)
	الفصل الثالث : النتائج والمناقشة
31	الشكل 1.III : تطابق بين نتائج حساب احتمال تفاعل بالموقع $P_{s,\gamma}$ بالبرنامج الحسائي وباستعمال محاكاة مونتني كارلو عند درجات الحرارة مختلفة $T_1 = 100K$ و $T_2 = 300K$ و $T_3 = 500K$ و $T_3 = 700K$ و $T_3 = 900K$ و $T_3 = 1100K$ بالنسبة لجزئ CH_3 .
32	الشكل 2.III : نتائج حساب احتمال التفاعل $P_{s,\gamma}$ بدلالة طاقة التنشيط في درجات حرارة مختلفة T_1, T_2, T_3 بالنسبة لجزئ CH_2 باستعمال محاكاة مونتني كارلو.
33	الشكل 3.III : نتائج حساب احتمال التفاعل $P_{s,\gamma}$ بدلالة طاقة التنشيط في درجات حرارة مختلفة T_1, T_2, T_3 بالنسبة لجزئ CH باستعمال النموذج النظري.
34	الشكل 4.III : نتائج حساب احتمال التفاعل $P_{s,\gamma}$ بدلالة طاقة التنشيط في درجات حرارة مختلفة T_1, T_2, T_3 بالنسبة لجزئ H باستعمال محاكاة مونتني.
36	الشكل 5.III : يوضح الاحتمال التفاعل على السطح لاعادة التركيب γ و الالتصاق s و الاحتمال الاجمالي على السطح β ل CH_3 .
38	الشكل 6.III : يوضح الاحتمال التفاعل على السطح لاعادة التركيب γ و الالتصاق s و الاحتمال الاجمالي على السطح β ل CH_2 .
38	الشكل 7.III : يوضح الاحتمال التفاعل على السطح لاعادة التركيب γ و الالتصاق s و الاحتمال الاجمالي على السطح β ل CH .
40	الشكل 8.III : احتمال التفاعل على السطح لاعادة التركيب γ و الالتصاق s و الاحتمال الاجمالي على السطح β ل H .
40	الشكل 9.III : احتمالات التفاعل للجذر H درجات الحرارة مختلفة

المقدمة العامة

المقدمة العامة :

تستخدم الطبقات الرقيقة على نطاق واسع في مختلف المجالات الصناعية والتكنولوجية، كما تستعمل في الاتصالات وصناعة شاشات العرض المرنة و صناعة الطائرات وأجهزة التسجيل الصوتي..... الخ. ومن الطرق الأكثر استخداما لتوضع الطبقات الرقيقة هي الترسيب الكيميائي لطور البخاري CVD والترسيب الفيزيائي لطور البخاري PVD .

تم اكتشاف الجرافين في عام 2004 و تم عزله عام 2010م في جامعة مانسستر من طرف العالمين أندريا جيم وكوستيا نوفوسيلوف، وهو مادة ذات خصائص مميزة يتكون من ذرات كربون نقية فقط تكون مرتبة في شبكة سداسية ومنتظمة، لقد أثار إعجاب الباحثين من حيث المزايا والخصائص الفريدة التي يمتاز بها لذلك يمكن انتاجه ، ومن الطرق الأكثر استعمالا لإنتاج الجرافين تقنية الترسيب الكيميائي لطور البخاري بدعم البلازما PECVD .

في هذا العمل نقوم بحساب احتمالات التفاعل للجذور CH_3, CH_2, CH, H مع السطح خلال ترسيب طبقة

الجرافين بتقنية الترسيب الكيميائي للبخار بدعم البلازما PECVD باستعمال الخليط الغازي (CH_4 / H_2) .

الفصل الأول هو مقدمة لتعريف الترسيب بتقنية CVD ومعرفة خصائص الجرافين والتعرف على الاحتمالات و محاكاة

مونتي كارلو .

في الفصل الثاني نقدم المحاكاة العددية لحساب احتمالات التفاعل على الموقع في حالة الارتباط P_S و في حالة اعادة

التركيب P_γ باستعمال محاكاة مونتي كارلو وكما نقدم النموذج النظري المنجز من طرف O. Babahani et al . نقدم في

هذا الفصل ايضا مختلف العلاقات الرياضية التي تربط احتمالات التفاعل على السطح في حالة الارتباط S و في حالة اعادة

التركيب γ والاحتمال الاجمالي للتفاعل على السطح β .

في الفصل الثالث نقدم مختلف النتائج المتحصل عليها بمحاكاة مونتي كارلو و باستعمال النموذج النظري لترسيب طبقة

الجرافين PECVD ونقارن نتائج حساب احتمالات التفاعل على الموقع . كما نعرض نتائج حساب احتمالات التفاعل على

السطح و مقارنة النتائج الاخيرة مع أعمال سابقة .

الفصل الأول :

عموميات حول الطبقات

الرقيقة و الجرافين

الفصل الأول : عموميات حول الطبقات الرقيقة والجرافين**I. مقدمة:**

في هذا الفصل نتطرق الى طرق توضع الطبقات الرقيقة و التقنيات المستعملة لتحضير مختلف الطبقات. نتعرف أيضا

على مادة الجرافين و استخداماته و مميزاته كما نتعرف على تحضير الجرافين بطريقة الترسيب الكيميائي للبخار بدعم البلازما

. PECVD

1.I. الطبقات الرقيقة (les couches minces):

دخل استعمال الطبقات الرقيقة كل مناحي حياتنا فهي مستعملة في وسائل المواصلات والسيارات والصواريخ وغيرها

كما نجدها في الأجهزة الالكترونية في المقاومات والترانزستورات وغيرها وتعد أساسا لتصنيع الخلايا الشمسية و الضوئية، كما

تدخل في صناعة الكواشف الكهرو بصرية [1] و في الصناعة الغذائية خاصة في التعليب و التغليف.

تعد تقنية استعمال الطبقات الرقيقة واحدة من أهم التقنيات التي ساهمت في تطوير صناعة اشباه الموصلات ،ويطلق

عادة مصطلح الأغشية الرقيقة على طبقة أو عدة طبقات من ذرات معينة قد لا يتعدى سمكها رتبة الميكرون. وهي ناتجة عن

تكاثف الذرات أو الجزيئات و ترسبها، تستعمل الطبقات الرقيقة لانخفاض كلفتها كما ان توضع طبقة رقيقة على ركيزة من مادة

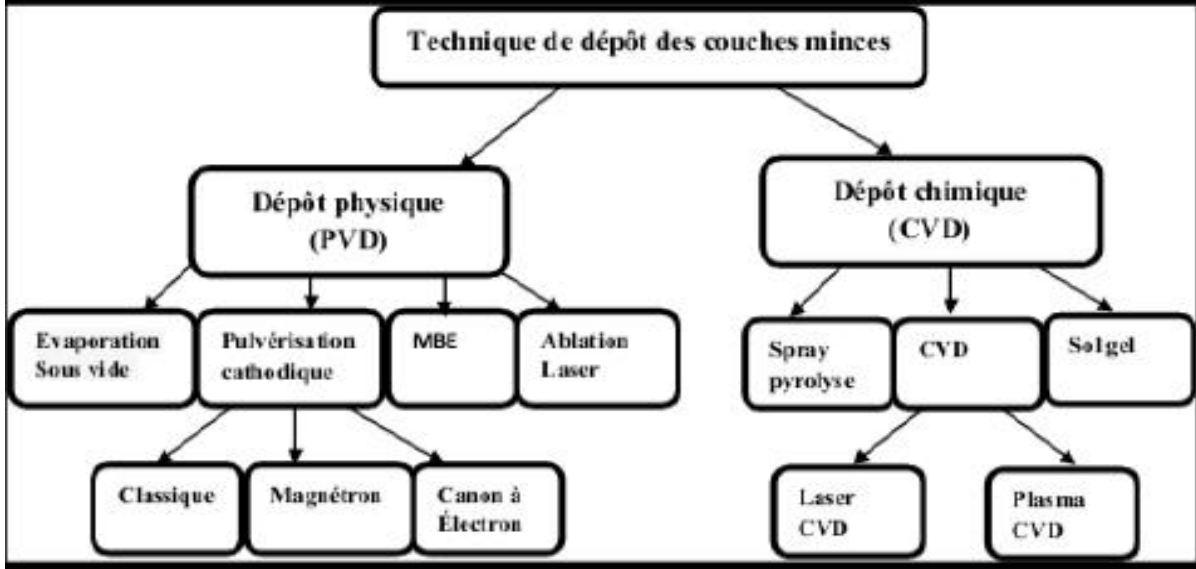
ما يكسب مادة الركيزة خواصا فيزيائية مغايرة و مختلفة عن خواصها الأساسية كطبقات الماس الصناعي التي تغطي آلات حفر

الابار البترولية.

فالطبقة الرقيقة هي قشرة رقيقة من مادة مرسب على مادة أخرى تدعى الركيزة (Substrat).

I.2. الطرق العامة لتوضع الطبقات الرقيقة:

يبين الشكل (I.1) الطرق العامة لتوضع الطبقات الرقيقة:



الشكل I.1: تقنيات ترسب الطبقات الرقيقة [2].

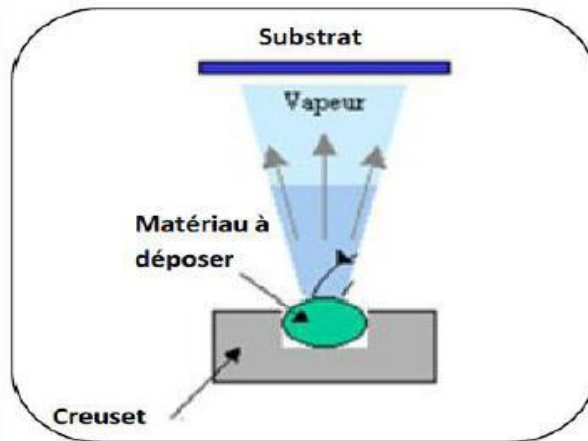
من الطرق الأكثر استخداماً لتوضع الطبقات الرقيقة:

I.2.1. الترسيب الفيزيائي للبخار (PVD) Dépôt Physique en Phase Vapeur:

تعتمد تقنيات PVD على الطرق الفيزيائية في التوضع و هي نوعان تقنيات التبخير و الرش في جميع أشكاله، تتم في وجود

ضغط منخفض ودرجة حرارة مرتفعة للمادة، يتم التكاثف على سطح الركيزة للحصول على الطبقة الرقيقة. يوضع الشكل (I.2)

مبدأ الأساسي لتبخير [3].



الشكل I.2: المبدأ الأساسي لتبخير [3]

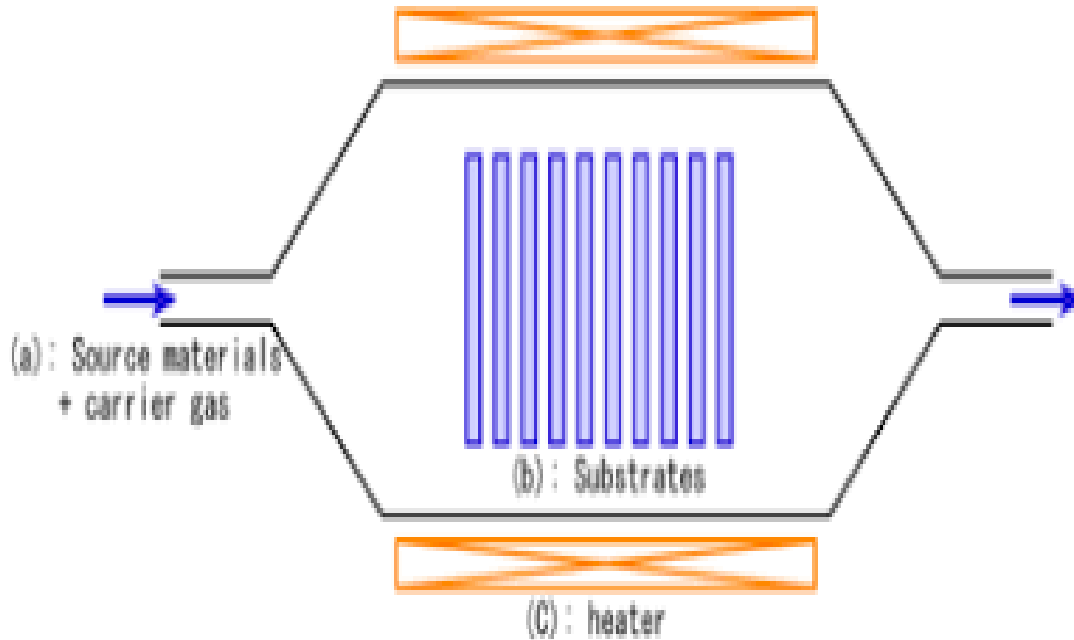
2.2.I. الترسيب الكيميائي لطور البخار (Chemical Vapor Déposition):

يعتمد مبدأ الترسيب الكيميائي للطور الغازي على تشكل طبقة صلبة من الطور الغازي نتيجة تفاعل كيميائي على سطح الركيزة ، تجرى العملية بتعرض رقاقة (الركيزة) إلى مركب أو عدة مركبات والتي تتفكك لتتفاعل على سطح الركيزة . يتم انتاج الجرافين بهذه التقنية بكميات كبيرة ،ويتم استعمال معادن محفزة تكون إما النحاس أو النيكل .والتي يتم ازلتها بعد تشكل الجرافين على سطحها وينقل الجرافين إلى معدن اخر عبر مراحل معينة وتكون الطبقات المنتجة للجرافين ذات جودة كما هو موضح في الشكل (3.I) [3].

تعتمد تقنية طريقة CVD في الظروف التجريبية المستعملة على:

- ✓ اختيار الركيزة.
- ✓ تحديد درجة حرارة تسخين الركيزة.
- ✓ اختيار الخليط الغازي المتدفق.
- ✓ تحديد الضغط الكلي للغاز .

ان الاختلاف في هذه الظروف ينتج عنه مواد ذات خصائص مختلفة



الشكل 3.I. مبدأ الترسيب الكيميائي لطور البخاري CVD [4].

I.3. أنواع و تقنيات الترسيب الكيميائي لطور البخاري :

✓ الترسيب الكيميائي لطور البخار بجفيز أو دعم البلازما (Palsma Enhanced Chemical Vapor Deposition) هو الالكترونات المتواجدة في البلازما [5].

✓ الترسيب الكيميائي لطور البخار بالليزر (Laser Enhanced Chemical Vapor Déposition) LECVD: العامل المفكك للغاز هو الليزر و تبلغ درجة حرارة الركيزة $500C^{\circ}$ - $2500 C^{\circ}$ [5].

✓ CVD thermique: هي ترسيبات ناتجة عن تفاعلات كيميائية بمحفز هو عامل ارتفاع درجة حرارة الغاز [5].

وهذا التفاعل يتم في ظروف عملية بطرق مختلفة [6]:

✓ الترسيب الكيميائي لطور البخار بضغط مخفض LPCVD .

"Low Pressure Chemical Vapor Deposition "

✓ الترسيب الكيميائي لطور البخار بالضغط الجوي APCVD .

"Atmospheric Pressure Chemical Vapor Deposition"

✓ الترسيب الكيميائي لطور البخار للمعادن القلوية OMCVD

"Organo-Metallic Chemical Vapor Deposition"

✓ الترسيب الكيميائي لطور البخار عن طريق بالتسخين السريع للركائز RTCVD

"Rapid Thermal Chemical Vapor Deposition"

✓ الترسيب الكيميائي لطور البخار بواسطة الأسلاك الساخنة HWCVD

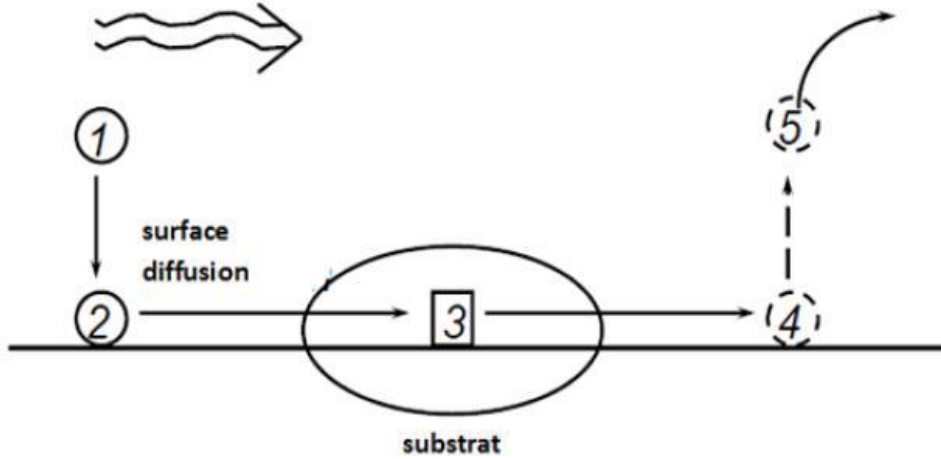
"Hot Wire Chemical Vapor Deposition"

I.4. تقنية النمو بطريقة الترسيب الكيميائي لطور البخار CVD:

مراحل التوضع بتقنية ال CVD موضحة في الشكل (4.I) [2]:

1. انتشار المتفاعلات الكيميائية في حجم المفاعل (Diffusion).

2. تتوجه المواد المتفاعلة نحو السطح (L'adsorption).
3. حدوث تفاعلات كيميائية على سطح الركيزة (Réactions Chimiques).
4. انتشار الغازات الناتجة من المتفاعلات الكيميائية بعيدا على السطح (Désorption).
5. خروج الغازات من حجم المفاعل.



الشكل I.4: خطوات الترسيب الكيميائي للبخار [2].

I.5. الظواهر الفيزيائية الحادثة أثناء توضع و نمو طبقة بواسطة الترسيب الكيميائي للبخار CVD :

I.5.1. ظاهرة الامتزاز (Adsorption):

تنشأ عملية الامتزاز نتيجة لظهور حالة عدم الإشباع أو عدم التوازن للقوى الجزيئية لسطوح المواد الصلبة

فالامتزاز ظاهرة شائعة جدا تحدث عند تلامس جزيئات الغاز أو السائل مع السطح وهو نوعان فيزيائي و كيميائي [3].

I.5.1.1. الامتزاز الكيميائي (Adsorption chimique):

ينطوي على تبادل بين الإلكترونات الركيزة والجزيئات المترسبة كما في حالة التفاعلات الكيميائية ينتج عنها تغيير في

خصائص المادة الصلبة حيث تتوضع ذرات جديد على السطح وتغير الطاقة المميزة (الروابط الكيميائية) .

تكون طاقة الربط الكيميائية بين الجزيئات أكبر من الطاقة في الامتزاز الفيزيائي ، يتميز هذا النوع من الامتزاز بتكوين روابط

كيميائية بين سطح الركيزة و الذرات أو الجزيئات المترسبة عليها ، و يصاحب هذا النوع من الامتزاز تكون طبقة أحادية الذرات

على سطح الركيزة [3].

I. 5. 1. 2. الامتزاز الفيزيائي (Adsorption Physique):

أو امتصاص ف

اندر فالز (Van der Waals)، ينتج عنها قوى تجاذب بين جزيئات سطح المادة الصلبة أي الركيزة و جزيئات

الغاز.

وتكون طاقة الربط الفيزيائية بين الجزيئات أقل من طاقة الربط في الامتزاز الكيميائي [5].

I. 5. 2. ظاهرة الانتزاز (Désorption) : هي ظاهرة معاكسة للامتزاز يتم خلالها خروج المتفاعلات من

سطح الركيزة الى الحجم الغازي ، يكمن الاختلاف بين الظاهرتين في كون ظاهرة الانتزاز هي انتشار الغازات أو الذرات الناتجة من

التفاعلات الكيميائية بعيدا عن السطح ، أما في الامتزاز فتتجه الجزيئات نحو سطح الركيزة .

يمكن أن نميز أربع آليات أساسية للتوضع كما هي موضحة في الجدول (1.I) [6]:

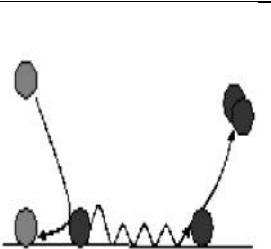
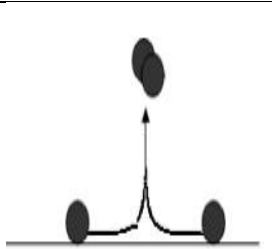
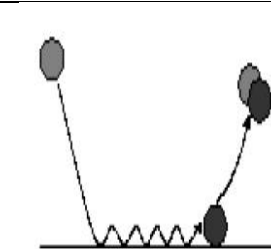
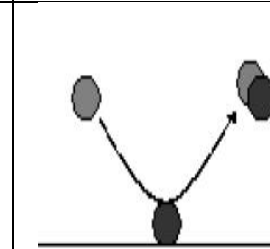
✓ آلية ايلي ريدال (Mécanisme d'Eley-Rideal)

✓ آلية هاريسون كازيمو (Mécanisme de Harris-Kasemo)

✓ آلية لونجمير-هنشلوو (Mécaniseme Langmuir-Himshelwood)

✓ آلية الامتزاز الناتجة عن التصادمات (Mécaniseme Désorption Induite Par Collision)

الجدول 1.I: الآليات الأساسية للتوضع [6]

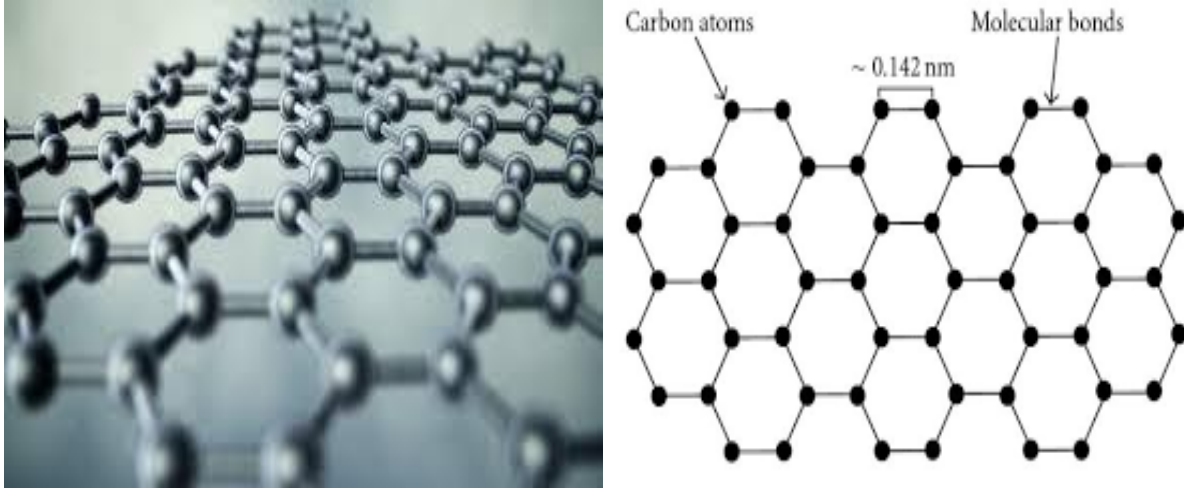
آلية الامتزاز الناتجة عن التصادمات	آلية لونجمير-هنشلوو	آلية هاريسون كازيمو	آلية ايلي ريدال
			

I.6. الجرافين (Graphène):

في عام 2004 تم عزل الجرافين من طرف العالمين كوستيا نوفوسيلوف (Kostya Novoseiov) واندريه جيم (Andre Geim) في جامعة مانشستر. و في عام 2010 تحصل كل من العالمين على جائزة نوبل في الفيزياء لقيامهما بتجارب على بنية الجرافين. فتكمننا من تسجيل خصائص يمتاز بها الجرافين عن بقية المعادن كالألماس و النحاس . الخ.

يطلق هذا الاسم على أحادي الطبقة المستوية ذات التهجين من نوع SP^2 فالجرافين هو بلورة ثنائية الأبعاد (bidimensionnel :2D) يتألف من ذرات الكربون النقية فقط التي تكون مرتبة في شبكة سداسية منتظمة متشابهة كبيوت النحل المتراصة. إن الجرافين يعد وحدة البناء الأساسية لمادة الجرافيت SP^3 و لكن بنيته الالكترونية مختلفة عن بنية الجرافيت . الجرافين هو احد المواد النانوكربونية لثم هو موضح في الشكل 5.I [7].

عند تجمع العديد من المستويات الجرافين نحصل على الجرافيت المادة الموجودة في قلم الرصاص. و هو مادة ثلاثية الأبعاد (متعددة الطبقات). نحصل عن الجرافين من الجرافيت بفصل مستوياته المتباعدة عن بعضها البعض. إن القوى التي تربط هذه المستويات هي قوى فاندر فالز الضعيفة [8].



الشكل 5.I : بنية الجرافين [8].

I. 6.1. بنية الجرافين:

I. 6.1.1. البنية البلورية:

الجرافين عبارة عن بلورة ثنائية الأبعاد تتألف من ذرات الكربون وهي كخلية مترابطة بواسطة روابط تساهمية، تحوي الخلية

الواحدة من الجرافين على ذرتين A و B تقع على مسافة $a_{c-c} = 1.42A^\circ$ وهي تتألف من شبكتين ثلاثيتين متطابقتين .

متجه الشبكات في الفضاء الحقيقي

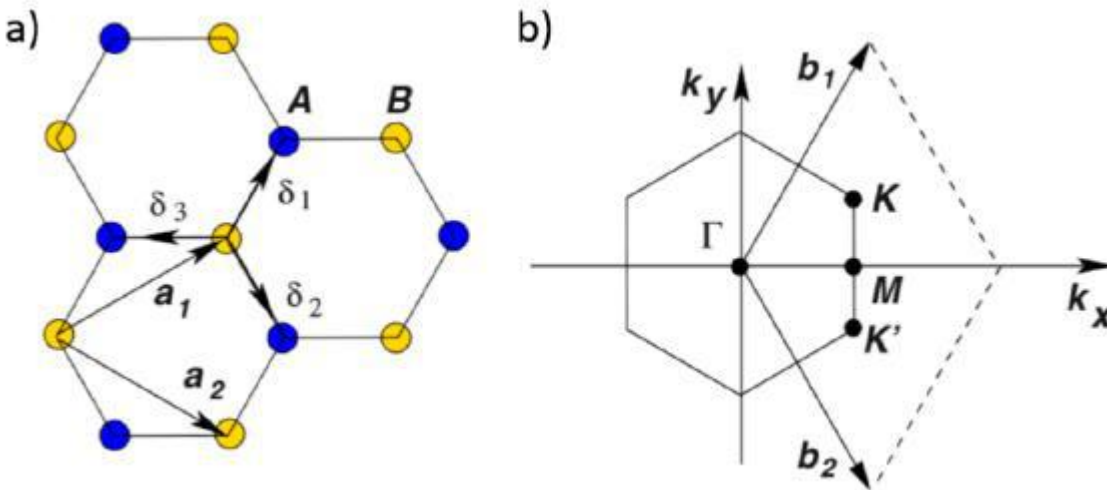
$$\vec{a}_2 = \frac{a_{c-c}}{2}(3\vec{i}, -\sqrt{3}\vec{j}) / \vec{a}_1 = \frac{a_{c-c}}{2}(3\vec{i}, \sqrt{3}\vec{j})$$

$$\|\vec{a}_1\| = \|\vec{a}_2\| = a = 2.456A^\circ \text{ : وثابت الشبكة في الفضاء العكسي}$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{3a_{c-c}}(1\vec{i}, -\sqrt{3}\vec{j}) \text{ و } \vec{b}_1 = \frac{2\pi}{3a_{c-c}}(1\vec{i}, \sqrt{3}\vec{j}) \text{ : وفي المستوى يتم تعريف المتجهات}$$

$$\text{ولدينا متجه الوحدة } K \text{ و } K' : K = \left(\frac{2\pi}{3a_{c-c}}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a_{c-c}} \right) \text{ و } K' = \left(\frac{2\pi}{3a_{c-c}}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a_{c-c}} \right) [9].$$

بين الشكل (I.6) أبعاد خلية الجرافين :



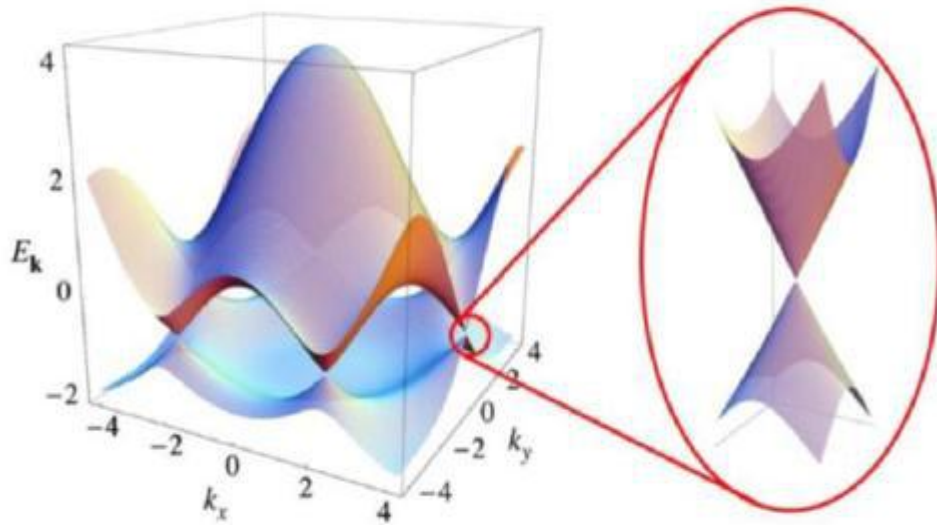
الشكل 6.I : أبعاد خلية الجرافين [9].

I. 1. 5. 2. البنية الإلكترونية:

التكوين الإلكتروني للكربون هو $1S^2 2S^2 2P^2$ وبالتالي الكربون له أربعة إلكترونات تكافؤ في الجرافين، في المدار s واثنين مدار p من ذرة الكربون C نوع التهجين sp^2 ، يتم توجه هذه المدارات ب 120° في المستوي الجرافين. وترتبط ذرات الكربون بروابط قوية σ و σ^* هي المسؤولة على تماسك الشبكة، و روابط π و π^* كما هو موضح في الشكل (7.I).

التركيب الإلكتروني المميز للجرافين يعطيه خصائص الكترونية مهمة. حركية الإلكترون عالية في الجرافين ويمكن أن تصل الى

$$\mu = 230000 \text{ cm}^2 / (\text{v.s}) \text{ في درجة الحرارة الغرفة في الجرافين المنتج بتقنية التقشير الميكانيكي [9].}$$



الشكل 7.I : البنية الإلكترونية للجرافين [9].

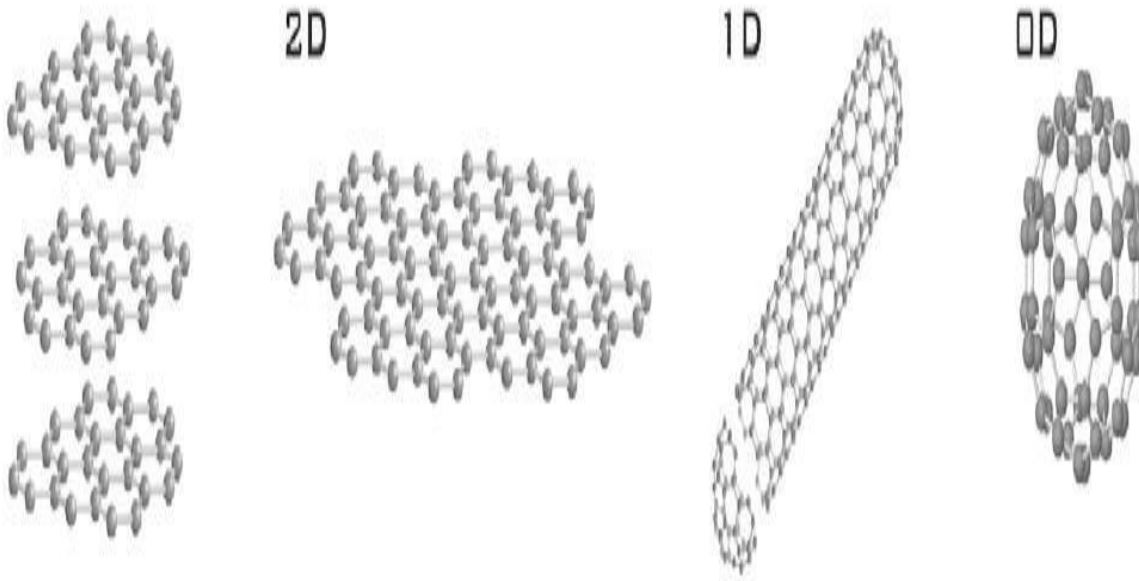
I. 2. 6. 2. تقنيات إنتاج الجرافين :

I. 2. 6. 1. إنتاج الجرافين بتقنية الترسيب الكيميائي للطور البخاري

(Chemical vapor Deposition):

ينتج الجرافين باستخدام تقنيات إنتاج مختلفة وهي تشبه التقنيات المستخدمة في إنتاج مواد الفلورين (les fullerenes) و

الانابيب النانو كربونية (les nonotubes de carbon) كما في الشكل (8.I) :

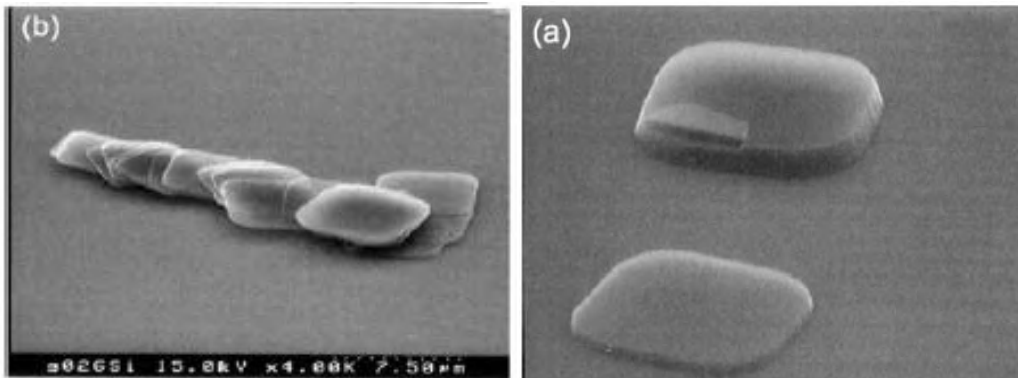


الشكل 8.I: الفلورين ، الأنابيب النانوكربونية ، الجرافين ، الجرافيت [10].

I. 2. 6. 2. إنتاج الجرافين بتقنية التقشير الميكروميكانيكية:

(Exfoliation micromécanique)

هي أبسط الطرق المستعملة يستعمل فيها الشريط اللاصق. استعملت من طرف rouff.all وهي لا تحتاج الى درجة حرارة عالية علاوة على ذلك يتم انتاج الجرافين بهذه التقنية من الجرافيت بخطوة واحدة وذلك بإيجاد وسيلة للحد من قوى فاندر فالز الضعيفة بين صفائح الجرافين وذلك بكسر الروابط بين المستويات لأن القوة بين الذرات أكبر من القوة بين المستويات . ان الجرافيت مادة طبيعة واسعة الانتشار و طبقات الجرافين المنتجة بهذه التقنية عالية الجودة . إلا أن العيب في هذه التقنية هو أن الكمية المنتجة من الجرافين قليلة جدا [10] كما هو موضح في الشكل (9.I) :

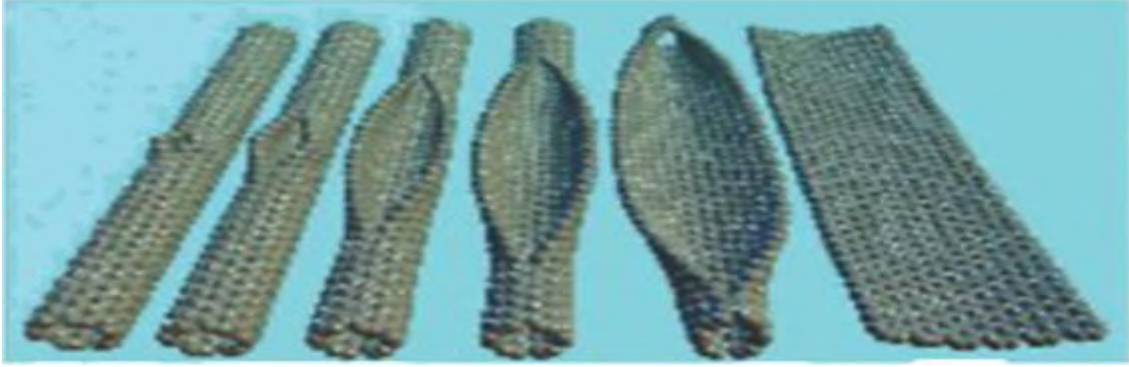


الشكل 9.I : تقنية التقشير المايكرو ميكانيكية [11].

I. 6. 2. 3. فتح الانابيب النانوكربونية (Ouverture de nanotubes de carbon):

في هذه الطريقة يتم فتح الأنابيب النانوكربونية في إنتاج الجرافين ونحصل على كميات صغيرة جدا كما هو موضح في الشكل

[10] (10.I).



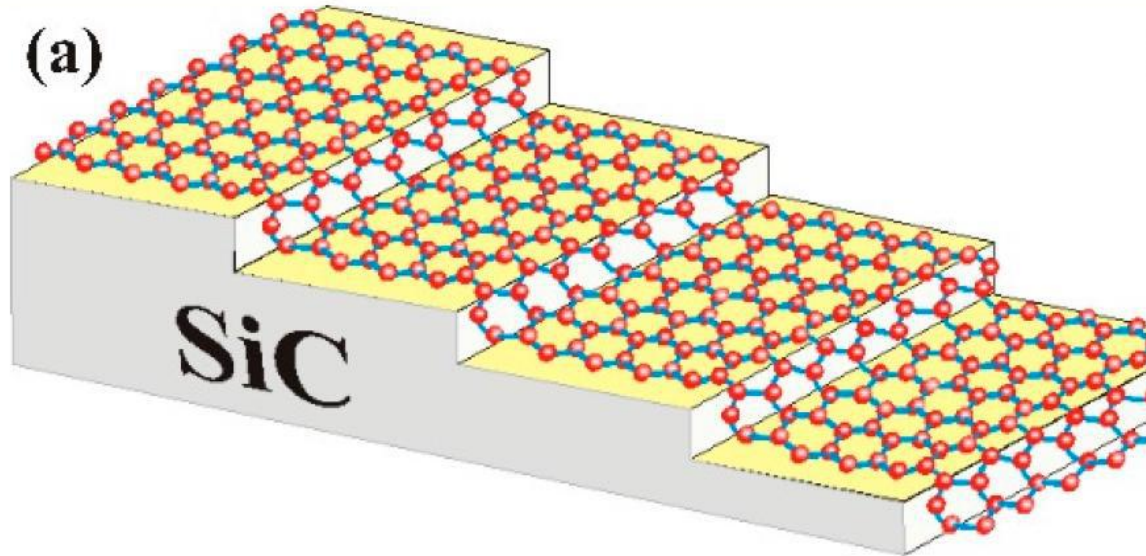
الشكل 10.I : تشكل الجرافين من الأنابيب النانوكربونية [10].

I. 6. 2. 4. نمو الجرافين على طبقة السيلكون (Croissance Graphène sur Silicon):

من أكثر التقنيات المستعملة، يتم فيها إنتاج الجرافين بكميات كبيرة ذات جودة عالية كما هو موضح في الشكل

(11.I)

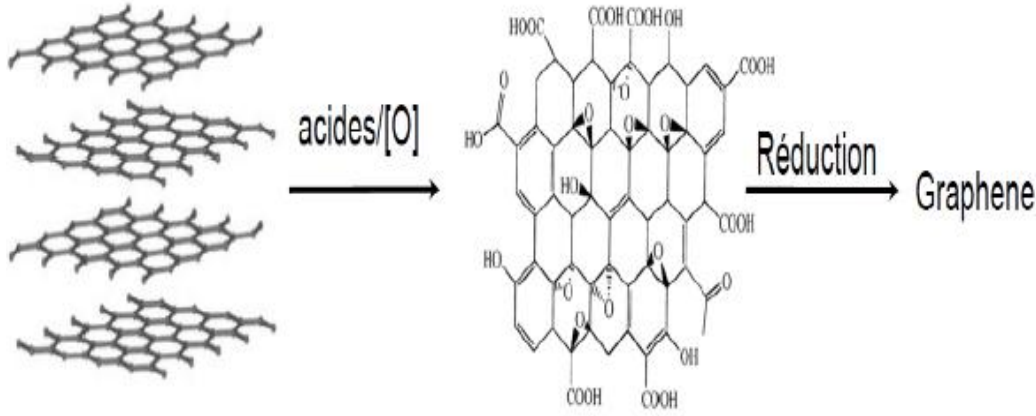
[12].



الشكل 11.I : تشكل الجرافين على طبقة السيلكون [12].

I. 6. 2. 5. تحول أكسيد الجرافين (Réduction d'oxyde de Graphène) :

أكسيد الجرافين هو مادة ثلاثية الأبعاد متناهية الصغر تتكون من ملايين طبقات الكربون المشتقة من أكسيد الجرافيت والمعدلة من قبل عدد من مجموعات الأكسجين بها يتميز أكسيد الجرافين بالاستقرار الكيميائي والذوبان والانحلال في الماء، وهي تقنية تتميز بإنخفاض كلفتها و يوضح الشكل (12.I) كيفية تحول أكسيد الجرافين [13].



الشكل 12.I : تحول الأكسيد الى جرافين [9].

I. 3. 6. 3. مميزات الجرافين :

لقد أثار الجرافين إعجاب الباحثين و ذلك من حيث الخصائص التي ينفرد بها وإمكانية استغلالها و إيجاد تطبيقات واسعة لها مجال الالكترونيات و الفيزياء و الكيمياء و علم المواد خاصة :

(1) بنية الجرافين بسيطة جعلته مادة سهلة التصنيع [14] .

(2) وحدة قياس سمك الجرافين هي رتبة النانومتر (nm), فهو من المواد المتناهية الصغر ذو طبقة رقيقة جدا مرنة وشفافة [15].

(3) الخصائص الالكترونية للجرافين وجدت اهتماما كبيرا من طرف الباحثين خاصة في التطبيقات التقنية وذلك لان سرعة الالكترونات فيه $1000Km/s$ أي 150 مرة مقارنة ب Si سليسيوم ($7Km/s$). الذي كان العنصر الأفضل ناقلية على الإطلاق قبل اكتشاف الجرافين عام 2004 [16] .

- 4) الروابط الكيميائية بين ذرات الكربون المشكلة للجرافين قوية جدا فهي روابط تساهمية أو تكافؤية مما يجعله يمتاز بالمتانة و الصلابة وتبلغ المسافة بين الذرات $1.42 A^0$ [17].
- 5) يمتص الجرافين 2.3% (للطول الموجي 550 نانومتر) من الضوء المرئي الذي يصدم سطحه ، مما يعني أنه بإمكانك الرؤية عبر هذه المادة فهي شفافة بنسبة 97.7% [18] .
- 6) يعتبر الجرافين كالجرافيت نوعا من أنواع الرصاص من حيث اللمعان و المرونة .
- 7) كان للعالمين كوستيا نوفوسيلوف و اندرية جييم فضلا في اكتشاف الناقلية الكهربائية فهي تعادل $7200(S/m)$ [19]. و الناقلية الحرارية مايقارب $(4.84 \pm 0.44) \times 10^3 w/m$ إلى $(5.30 \pm 0.48) \times 10^3$ [20]، الممتازة للجرافين رغم بنيته الثنائية الأبعاد فهو مادة استثنائية خارقة للعادة .
- 8) حركية الشحنات $2.10^5 cm^2 v^{-1} s^{-1}$ أكبر قيمة معروفة خلال سنة 2013 [21] .
- 9) الجرافين مادة قوية 200 مرة من الفولاذ [22].

I. 4.6. استخدامات الجرافين :

نظرا للخصائص الرائعة للجرافين فقد جذب اهتمام الباحثين فيمكن أن يستخدم في:

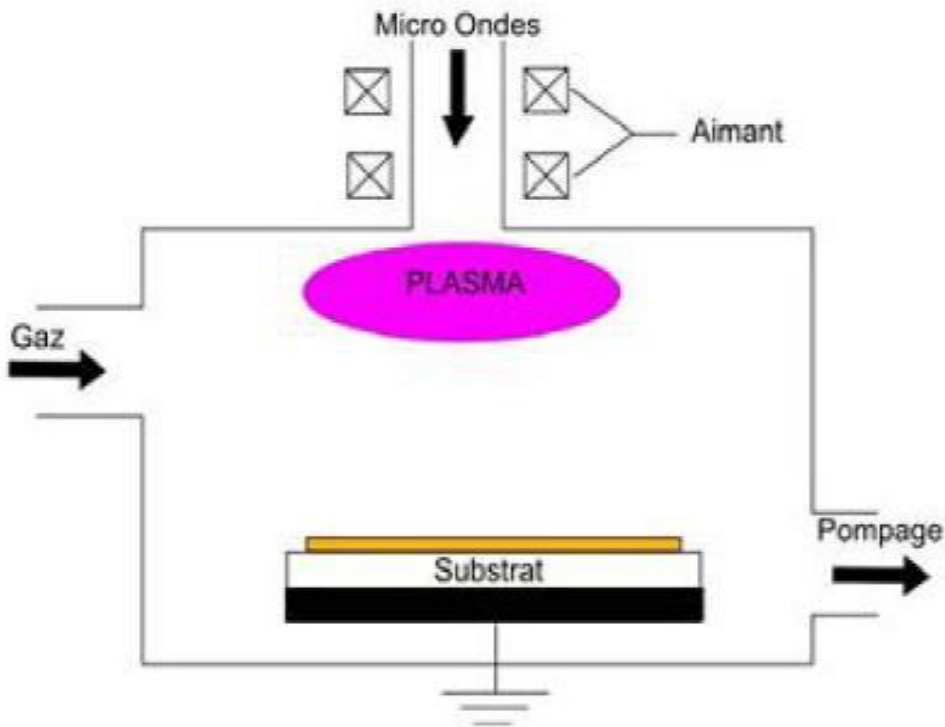
1. شرائح حاسوبية ضوئية عالية السرعة، تعمل بالضوء بدلا من الكهرباء [23].
2. بطاريات البوليمرات الجرافينية التي تسمح للسيارات الكهربائية بالسير لمدى 800 كلم وصناعة الطائرات لكونه مادة خفيفة ذات متانة عالية [21].
3. تصنيع الخلايا الشمسية الرقيقة و الكهربائية و الديودات المضئبة [24].
4. الاتصالات و شاشات العرض المرنة للهواتف الذكية و أجهزة التسجيل للصوت والموسيقى [23].
5. حساسات حرارية عالية لدقة لتقنيات الرؤية الليلية [23].
6. يستخدم كمادة لطلاء الصدأ فهي مادة تحمي من التآكل [25].
7. يمكن استخدامه لتصفية المياه [13].

7.I. انتاج ونمو الجرافين بتقنية PECVD على طبقة من النحاس باستعمال الخليط الغازي (CH_4/H_2) :

طريقة الترسيب الكيميائي البخاري من بين الطرق المستعملة بكثرة لإنتاج الجرافين بأنواعه المختلفة بسبب التكلفة المنخفضة لهذه التقنية و لكونها ذات كفاءة عالية .

1.7.I. تقنية PECVD:

هي واحدة من تقنيات الترسيب الكيميائي للبخار CVD تسمح بنمو الطبقات في درجات حرارة منخفضة. في هذه الطريقة يتم تفكك الغازات المتفاعلة بواسطة الالكترونات المتواجدة في البلازما أو التفريخ الكهربائي و يمكن أن تتولد البلازما إما عن طريق ترددات الراديو (RF) الأكثر استخداما في مجال الالكترونات الدقيقة او غيرها من المجالات [26].



الشكل 13.I : مفاعل PECVD لإنتاج الطبقات الرقيقة [26].

2.7.I. ايجابيات تقنية PECVD :

- ✓ وجود البلازما تسمح لنا بالعمل في درجات حرارة منخفضة والتي تعمل على تنشيط التفاعلات الكيميائية.
- ✓ تشكل مجموعات واسعة من الأنواع الكيميائية، كما يمكن لهذه الأنواع أن تتفاعل مع بعضها البعض.
- ✓ للحصول على البلازما يجب استخدام ترددات الراديو في المفاعل ذات التواتر (13.56 MHZ) أو ترددات الموجات الدقيقة Micro-onde ذات التواتر (2.45 GHM) [2].

8. I. تركيب الجرافين CVD :

- أصبح النحاس على وجه الخصوص الأكثر استخداما على نطاق واسع في إنتاج الجرافين . بسبب سهولة انتشار ذرات الكربون على سطح النحاس مما يسهل عملية نمو الطبقات الرقيقة إضافة إلى كون النحاس متوفر بكثرة و غير مكلف.
- كما يتم نمو الجرافين على النحاس باستخدام غاز الميثان CH_4 كمصدر لذرات الكربون و غاز الهيدروجين H_2 او الارحون [25] .

ندرس آليات النمو على الفلزات الانتقالية مثل النحاس (Cu) ، والنيكل (Ni) بما في ذلك التطورات الجديدة والتجارب في نمو الجرافين بدون نقل المواد العازلة.

علينا التركيز على دور معايير التركيب المختلفة ، بما في ذلك الجوانب الحرارية من المعايير الكيميائية و الفيزيائية و الخصائص المورفولوجية للركيزة المحفزة [26] .

ينمو الجرافين على النحاس بتحليل غار الميثان على الركيزة (النحاس) عند درجة حرارة 1000 C° ، النمو في الغالب يكون أحادي الطبقة على رقائق النحاس . وقد تم استعمال مادة الهكسان في درجة حرارة 950 C° مع معرفت امكانية استعمال (الميثان ، الهكسان) التي لها القدرة على تنشيط الجرافين عند تركيبه باستعمال النيتروجين و البورن الذي يحتوي علي المذيبات العضوية .

يتم تحديد المعايير الأولية للوصول الى أحسن الطبقات و معظم الترسيبات التي أجريت على النحاس تتراوح سمكها ما بين $50-25\mu\text{m}$ وقد ترسب الجرافين مؤخرا بالحزم الالكترونية على النحاس و التبخر الحراري للأغشية الرقيقة كما اقترحت خطوات أخرى لنمو الجرافين على النحاس هي [27] :

✓ خطوة التسخين:

تسخين سطح الركيزة مع الغازات (في المفاعل) إلى درجة الحرارة اللازمة لنمو الجرافين .

✓ خطوة الصلب :

لبدأ التفاعل الكيميائي كأول عملية يجب الحفاظ على درجة حرارة السطح و الغاز لدراسة خصائص السطح من خشونة وحجم وكذلك لتجنب التبخر المعدني قدر الإمكان .

✓ خطوة النمو :

في بداية هذه العملية ينمو الجرافين على سطح الركيزة (النحاس) ، و خلال عملية النمو تكون هناك عدة استراتيجيات لنمو طبقة الجرافين .

تتم هذه العملية بخطوة واحدة أو عدة خطوات، وخلال هذه الخطوات يتم تعديل الضغط و المزيج الغازي ومن المهم أن نأخذ بعين الإعتبار طبيعة المحفز ، وقد ينمو الجرافين في هذه الخطوة أو الخطوة اللاحقة.

✓ خطوة التبريد:

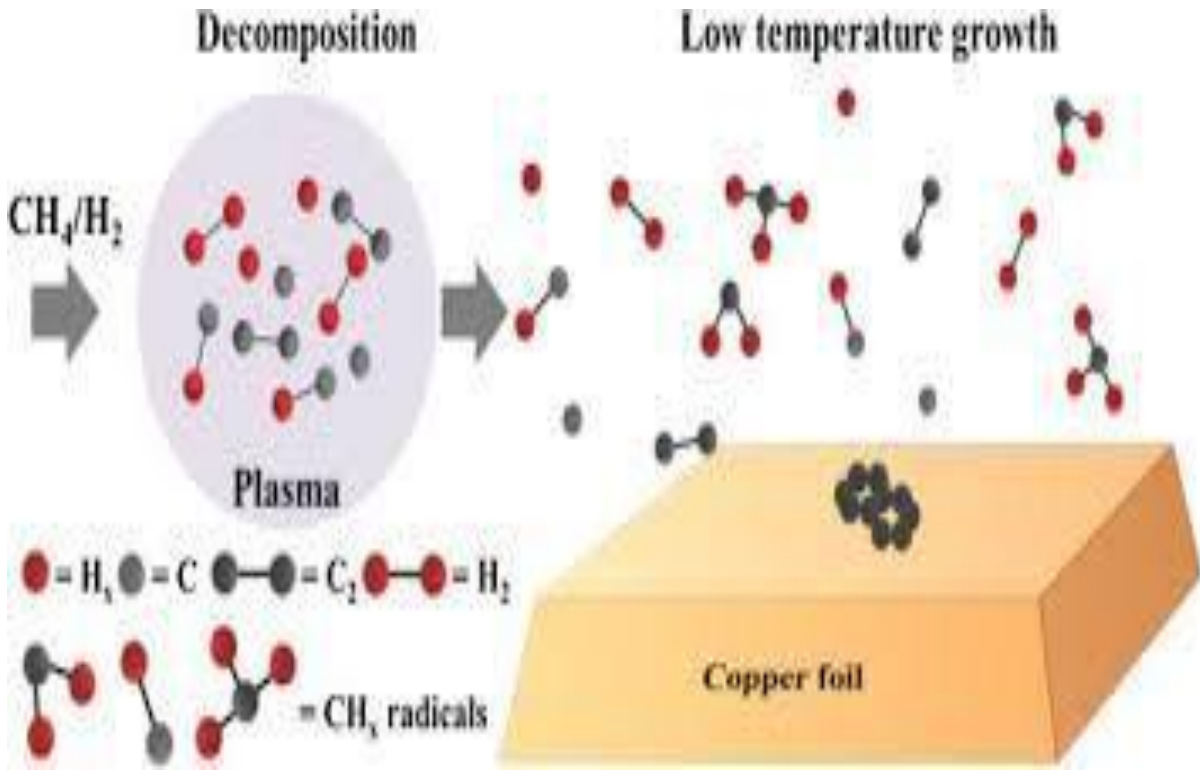
بعد مرحلة النمو تأتي مرحلة تبريد المفاعل ويتم تبريد العينة سريعا إلى درجة حرارة الغرفة $25\text{ }^{\circ}\text{C}$ حتى لا تحدث أكسدة للسطح

الغير مغطى أو أكسدة الجرافين functionalization .

التبريد خطوة بالغة الأهمية للسيطرة على النمو ويتم التبريد عن طريق إيقاف طاقة التسخين .

✓ الخطوة الاخيرة

ادخال غازات خاملة الى المفاعل و زيادة الضغط حتى يصل الضغط الى الضغط الجوي .



الشكل 14.I : تشكل الجرافين على النحاس

9.I. احتمالات التفاعل على السطح :

تحدث مجموعة من التفاعلات في الغاز لإعطاء جذور باعتماد على خصائصها، يحتمل أن تتفاعل الجذور النشطة الناتجة من تفكك المزيج الغازي مع الركيزة تتم باحتمالات التفاعل. ويوجد نوعين من احتمالات التفاعل :

(1) احتمالات التفاعل على الموقع :

- احتمال التفاعل بالارتباط (الالتصاق) P_s وهو ارتباط الجذر النشط بالموقع الفارغ و يصبح الموقع مشغولا ومرتبط بذرة تساهم في نمو الطبقة.
- احتمال التفاعل بإعادة التركيب P_r و هو عملية انتزاع ذرة هيدروجين من الموقع و ارتباط الجذر النشط بما ثم مغادرته السطح وهو ما يسمى بإعادة التركيب.

لقد استخدم مفهوم احتمالات التفاعل على الموقع [4] في توضع طبقة رقيقة من $Si-H$ باستعمال خليط (SiH_4 / H_2)

بطريقة CVD بدعم البلازما.

(2) احتمالات التفاعل على السطح : تنقسم الى ثلاث أنواع

- احتمال اعادة التركيب γ .
- احتمال الارتباط s .
- احتمال التفاعل الكلي على السطح β و يعطى بالعلاقة $\beta = s + \gamma$.

I. 10. كمونات التفاعل :

كمون coulombiens écran

هناك العديد من كمونات كولوم التي يمكن استخدامها في المحاكاة الرقمية [5]:

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \phi\left(\frac{r}{a}\right) \dots (2)$$

Z_1, Z_2 أعداد ذرية للذرتين ، e الشحنة الالكترونية ، r المسافة بين الذرتين ، ϕ دالة الحجب

أمثلة عن كمونات أخرى :

I. 1.10 كمون Bohr : يستعمل في الفصل بين ذرتين في أوسع النطاق .

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \exp\left(-\frac{r}{a}\right) \dots (3)$$

I. 2. 10. كمون موليير Potentielle Molière

يستخدم هذا الكمون لتحديد التفاعلات سواء متجانسة أو غير متجانسة

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \left[0.35e^{-0.3\frac{r}{aF}} + 0.55e^{-1.2\frac{r}{aF}} + 0.1e^{-0.6\frac{r}{aF}} \right] \dots (4)$$

I. 3. 10 كمون Kr-C (1977) W.D.Wilson, L.G. Haggmark, J.P. Biersak; Phys. Vol. 15, 2458,

أنشئ من قبل ويلسون و آخرون مع الأخذ بعين الاعتبار ل غونتر وقد أثبتت فعاليته

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \left[0.109045e^{-0.2788544\frac{r}{a}} + 0.473674e^{-0.637174\frac{r}{a}} + 0.335381e^{-1.919249\frac{r}{a}} \right] \dots (5)$$

ZBL 4.10. I

$$au = 0.88534ab(Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23})^{-1} \dots (6) \text{ يعرف}$$

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2}{r} \left[0.28171e^{-0.20162 \frac{r}{aU}} + 0.28022e^{-0.4029 \frac{r}{aU}} + 0.50986e^{-0.94229 \frac{r}{aU}} + 0.18175e^{-3.1998 \frac{r}{aU}} \right] \dots (7)$$

Potentiels de Lenz et Jensen 5.10. I

يعرف ب :

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \left[0.01018e^{-0.26 \frac{r}{a}} + 0.2433e^{-0.3876 \frac{r}{a}} + 0.7466e^{-1.038 \frac{r}{a}} \right] \dots (8)$$

Potentiels de Born-Mayer : ماير - 6.10. I

P. M. Morse; Phys. Rev., Vol. 34, 57 (1929).

$$: U(r) = A_{BM} \exp\left(\frac{r}{a_{AB}}\right) \dots (9) \text{ يوضح بالعلاقة التالية}$$

للحصول على المعاملات لكمون بورن-ماير : في الحالة المتجانسة للتفاعل يمكن أن نأخذ

$$A_{BM} = \sqrt{A_{BB} A_{MM}} \dots (10) \quad , a_{AM} = 2 \frac{a_{AA}^* a_{MM}}{a_{AA}^* + a_{MM}} \dots (11)$$

7.10. I Potentiels attractifs الكمون الجاذبية

كمونات الجاذبية تستخدم بشكل مستمر :

• **Potentiels de Morse** كمون مورس

$$U(r) = D \exp[-2a(r-r_0)] - 2D \exp[-a(r-r_0)] \dots (12)$$

• **Potential de Lennard et Jones** كمون رينارد و جونس

كمون التفاعل بين الجذور على السطح :

$$U(z) = \frac{(\pi \xi N r_0^3)}{3} \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{r_0}{z}\right)^3 + \frac{1}{15} \left(\frac{r_0}{z}\right)^9 \right] \dots (13)$$

● **Potentiels combinés** المشتركة

كمونات تستخدم مزيج مثل بورن ماير مورس و مورس ماير .

● **Potentiels empiriques** كمونات تجريبية

مشتقة من مجموع الطاقات ، وهذا وفق الثوابت المرنة والطاقة المتماسكة ، وجد نموذج تجريبي يستند على النموذج النظري قام

بتصويرها داجنس Dagens وفق المعادلة :

$$U(r) = \left[1 - \exp(-a(r-n)^2) \right] \left[C_0 + \frac{C_0 \cos \chi}{r^2 r^3} + \frac{S_1}{r^5} \sin \chi \right] + \sum_{i=0}^3 \frac{B \exp(-\beta r^2)}{r^{3-i}} + D \exp(-\gamma r) \dots (14)$$

I. 11. محاكاة مونتي كارلو:

يعتبر عام 1949 مولد طريقة مونتي كارلو وذلك عندما صدرت مقالة تحت اسم "طريقة مونتي كارلو" ويعتبر العالمين الرياضيين الأمريكيين فون نيومان Von Neumon و أولام Ulam المؤسسين لهذه الطريقة .

ولقد عرف الأساس النظري للطريقة منذ فترة طويلة حيث كانت المشاكل الإحصائية تحل في القرن التاسع عشر وبداية القرن العشرين عن طريق الاختيارات العشوائية أي بواسطة طريقة مونتي كارلو . ولم تكن هذه الطريقة مستخدمة باتساع قبل ظهور الحاسبات الإلكترونية حيث أن محاكاة الكميات العشوائية كانت تتم يدوياً وهذا أمر مجهد للغاية. ولهذا فإن بداية استخدام طريقة مونتي كارلو كتقنية رقمية عالمية أصبح ممكناً فقط عند ظهور الحاسبات. ولذلك تعد طريقة مونتي كارلو أول أسلوب للمحاكاة حيث وضعت لحل مشكلة سلوك النيوترونات في معامل لوس آلاموس حيث اقترح العالمان الأمريكيان فون نيومان و أولام هذه الطريقة خلال الحرب العالمية الثانية. ولقد أعطاها الاسم الكودي "مونتي كارلو" نظراً لسرية العمل الذي كانا يقومان به. اقترح العالمان حلاً بالاستعانة بعجلة الروليت (وهي من الأجهزة الميكانيكية البسيطة التي تستخدم للحصول على الكميات العشوائية) وخطوة بخطوة اندمجت احتمالات الأحداث المنفصلة في صورة متكاملة وأعطت حلاً تقريبياً للمشكلة. ومن ثم استخدم هذا الأسلوب بعد الحرب العالمية الثانية في كافة المجالات المدنية سواء كانت هندسية أو اقتصادية فضلاً عن الجانب العسكري.

وفي ضوء ما تقدم فإن طريقة مونتي كارلو تعد وسيلة لدراسة القوانين العشوائية حيث اعتمدت في البداية على عجلة الروليت إلا أنها في الحقيقة قد استخدمت الأعداد العشوائية التي طور استخدامها وفقاً لكل حالة من حالات تطبيق هذا الأسلوب. إن هذه الطريقة طبقت لحل المشاكل التي تعتمد على الاحتمالات حيث يصعب عمل تجارب طبيعية [6].

I. 1.11. مبدأ محاكاة مونتي كارلو :

تعتمد المحاكاة العددية على أساس الميكانيك الاحصائية، و تستخدم لربط بعض المعايير الميكروسكوبية و الكميات الماكروسكوبية القابلة للقياس عن طريق التجربة . في الواقع بفضل طريقة مونتي كارلو يمكننا حساب كميات مثل درجة الحرارة، و الضغط أو الكثافة في تجمع جزيئات من المعايير الأساسية مثل الأحجام وكتل الذرات و مختلف تفاعلات النظم الخاصة بها. كما تستند الفكرة الأساسية لطريقة مونتي كارلو ، على الاختيار العشوائي للهيئات وحساب طاقة التفاعل أثناء ذلك حيث تستخدم هذه المحاكاة في :

- ❖ فيزياء الجسيمات.
- ❖ النمذجة الجزيئية.
- ❖ الفيزياء الفلكية.
- ❖ نظرية الحقل الكمومي.

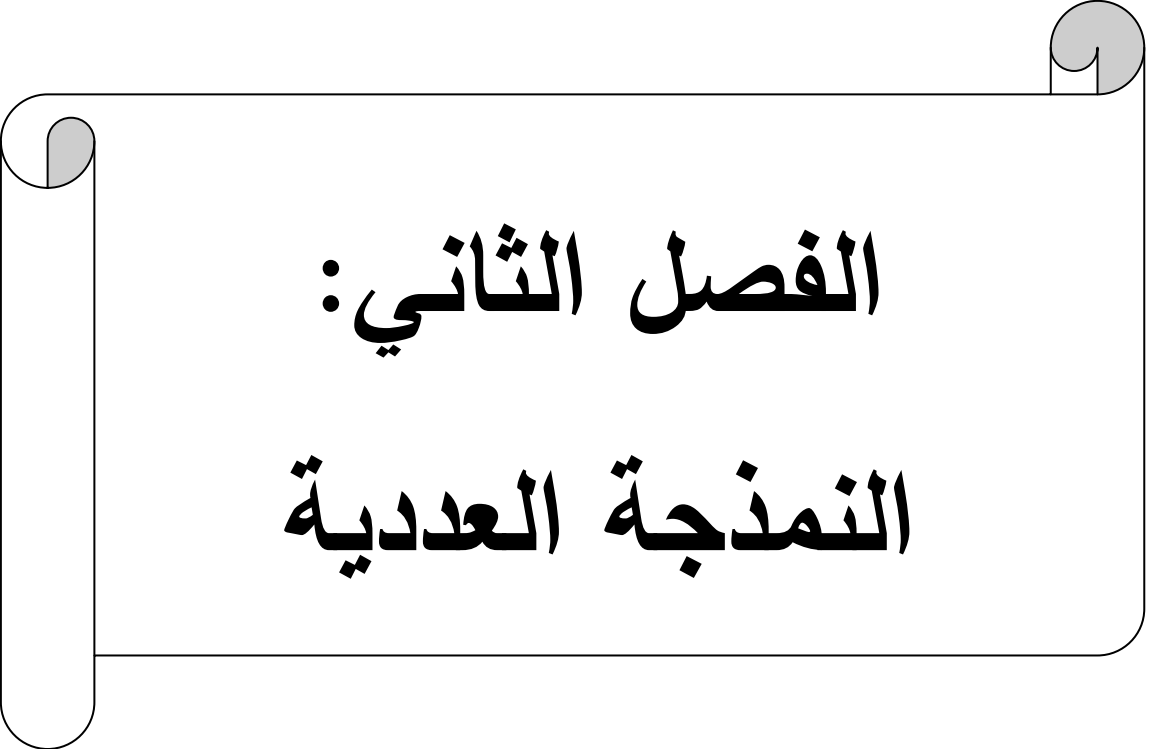
I. 2.11. مميزات محاكاة مونتي كارلو :

- (1) تساعد المحاكاة في توفير زمن أقصر في حل المشاكل التي نواجهها وتأخذ في صعيد الواقع أزمناً طويلاً .
- (2) تساعد المحاكاة في تجنب المخاطر و الكلف الكبيرة في حل المشاكل من خلال اجراء تجربة دون التطرق الى المشكلة الحقيقية وإنما تمثيل المشكلة وتوليد البيانات عنها بالحاسوب .
- (3) توفر المحاكاة مرونة أكثر في إجراء التغيير الذي ينشده الباحث مقارنة بالواقع في إجراء التجارب الحقيقية الذي يكون من الصعب إجراء أي تغيير عليها.
- (4) يساعد أسلوب المحاكاة في التعرف على الصعوبات التي تواجه حل المشكلة ، كما يهيئ لمتخذ القرار ملاحظة التغيرات التي تطرأ على صياغة المشكلة في حالة تنفيذها .

(5) تلعب المحاكاة دوراً مهماً في دراسة وحل المشاكل المعقدة والمتداخلة عن طريق دراسة النظام ومشاهدة نتائجه بصورة واضحة مما يسهل اتخاذ الإجراءات لتطوير ذلك النظام.

I 3.11 قيود المحاكاة:

- (1) يجب توفر المعلومات الكافية عن أجزاء و خصائص النظام من أجل التنبؤ بالطريقة التي يعمل بها النظام.
 - (2) أسلوب المحاكاة يمكن أن يحاكي الأمور المستقبلية عند اجراء التجربة وعندما نحاكيها قد لا نتوصل الى نتائج.
 - (3) في بعض التجارب قد تكون المتغيرات في المشكلة الحقيقية وصفية بمعنى أنها متغيرات لا يمكن أن تكون رقمية.
- هناك بعض المشاكل الكبيرة والمعقدة في الحياة كالمشاكل العسكرية التي تحتاج الى متغيرات كثيرة مما يؤدي الى تعقيد وصعوبة حلها رياضياً ومن ثم برمجتها وقد تكون التجزئة للحاسبة لا تتحملها.



الفصل الثاني:
النمذجة العددية

الفصل الثاني : النمذجة العددية

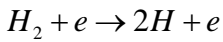
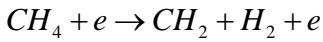
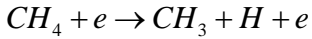
II. المقدمة:

في هذا العمل، نحن بصدد حساب احتمالات التفاعل على الموقع لإعادة التركيب P_γ (Recombination) بانتزاع H وللاارتباط (Collage) (P_S) باستعمال احتمالات محاكاة مونت كارلو. وباستعمال النموذج النظري ونقارن النتائج لاستنتاج احتمالات التفاعل على السطح بالالتصاق $Collage$ (S) بإعادة التركيب $Recombination$ (γ) ثم إيجاد الاحتمال الاجمالي للتفاعل على السطح β .

1.II. الظاهرة الفيزيائية:

المزيج الغازي الذي يستعمل لتحضير الغرافين بتقنية $PECVD$ و الذي يدخل الى المفاعل هو خليط من (CH_4 / H_2) تتدخل الالكترونات المتواجدة في البلازما أو التفريغ الكهربائي لتفكيك المزيج الغازي عن طريق التصادمات والتفاعلات الكيميائية في حجم المفاعل فينتج عن هذه العملية تشكيل العديد من الجزيئات و الأيونات و الجذور النشطة . تساهم نواتج التفكك في التفاعلات الكيميائية على سطح الركيزة فتؤدي الى تشكيل و نمو طبقة الجرافين . من العناصر التي تشارك في التفاعلات الكيميائية على سطح الركيزة : الجزيئات H_2, CH_4, C_2H_2 و الجذور CH_3, C_2H_5 ، H, CH .

بعض التفاعلات الكيميائية في الطور الغازي لتشكيل الجرافين :



على السطح :

يحتوي سطح الركيزة على مواقع شاغرة نشطة كيميائيا (DB (Sites Libres) ومواقع أخرى غير فعالة مهدرجة Sites

occupés تتفاعل معها الجذور النشطة بانتزاع ذرات الهيدروجين (Abstraction d'atome H) وهذا للحصول على مواقع

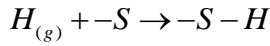
نشطة .

إن التفاعلات على سطح الركيزة لا تحدث دائما فهي تتم باحتمالات :

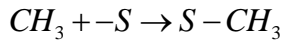
- إذا كان الموقع شاغرا فإن التفاعل الممكن حدوثه هو تفاعل إرتباط الجذر النشط بالموقع . لذلك يكون احتمال هذا التفاعل هو احتمال إرتباط بالموقع (الالتصاق) P_s Collage .
- أما إذا كان الموقع مهدرجا فالتفاعل الممكن حدوثه هو تفاعل إنتزاع الهيدروجين بواسطة CH_3 مثلا وإعادة تركيب CH_4 لذلك يسمى احتمال التفاعل باحتمال إعادة التركيب P_γ recombison .

3. II. بعض التفاعل التفاعلات الكيميائية على السطح :

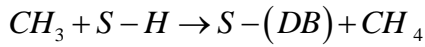
Collage de H sur DB



Collage de CH_3 sur DB

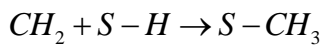


Abstraction de H par le radical CH_3 de $S - H$



Collage de $CH_{2(g)}$ + $S- \rightarrow S - CH_2$

Recombinaison de CH_2 sur DB



4. II. كمون تفاعل الجذر - السطح :

بعيدا عن السطح، تكون طاقة التفاعل للجزيئات المحايدة مع المواقع DB مهملة ، وقرىبا من السطح طاقة التفاعل لهذه الجزيئات مع السطح مهمة جدا .

$$E(Z) = \frac{A}{Z^n} + \frac{B}{Z^m}$$

كمون التفاعل (m,n) بين الجزيئات و السطح يعبر ب

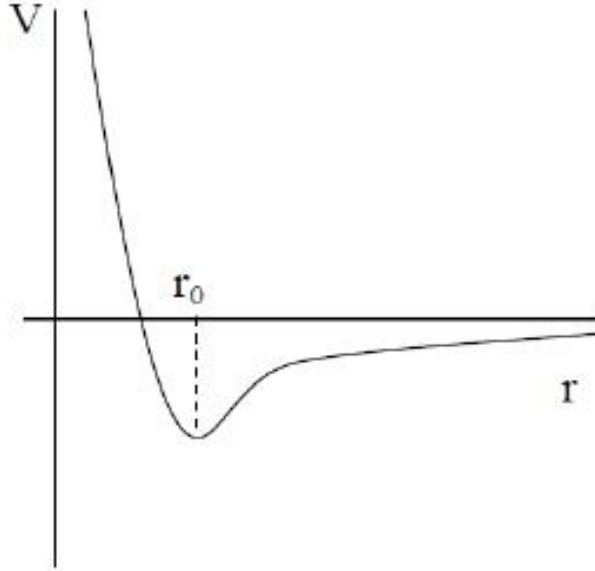
حيث Z هي المسافة بين الجزيئات و السطح [5].

A و B هي معاملات .

$E_{\infty} < 0$: عمق البئر الكموني، وهي القيمة الحدية الدنيا ل $E(z)$ الموافقة ل $Z = Z_0$ حيث Z_0 هي بعد الجسيمة عن السطح

استعملنا كمون لينارد جونز 3.9

La potentiel d'interaction radical surface de Lennar-Jones(3,9)



الشكل 1.II : كمون التفاعل (9.3)

قمنا بحساب كمونات التفاعل للجذور الناتجة من تفكك الخليط الغازي و ذلك بالعلاقة [5]:

$$U(Z) = \frac{\pi \xi N r_0^3}{3} \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{r_0}{Z} \right)^3 + \frac{1}{2} \left(\frac{r_0}{Z} \right)^9 \right] \dots\dots\dots (1.II)$$

5. II. احتمالية التفاعل على الموقع SRP واحتمالية التفاعل على السطح SFRP :

La probabilité de réactivité sur site SRP et la La probabilité de réactivité à la surface SFRP :

حتى يتم التفاعل يجب أن يكون الجذر النشط طاقة تنشيط E_a عن طريق اعادة التركيب γ و الالتصاق s يجب أن تكون

$$E_{tot} > E_a$$

وتعرف علاقة احتمال SRP ب [29]:

$$P(k, L) = \left[\frac{4}{3\sqrt{\pi}} \frac{V_1^3}{\sigma^3} + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{V_1}{\sigma} \right] \exp\left(-\frac{V^2}{\sigma^2}\right) + \left[1 - \text{erf}\left(\frac{V_1}{\sigma}\right) \right] \dots\dots\dots (2.II)$$

وعند $E_a + E_w \geq 0$ ، K هي نوع الجذر ، L تأخذ قيمتين اما 1 او 2

حيث $\sigma = \sqrt{\frac{2K_B T}{m_K}}$ و $V_1 = \sqrt{\frac{2(E_a + E_w)}{m_K}}$ عند التعويض في المعادلة (2.II) نجد (3.II) :

$$P(k, L) = \left[\frac{4}{3\sqrt{\pi}} \left[\sqrt{\frac{(E_a + E_w)}{k_B T}} \right]^3 + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left[\sqrt{\frac{(E_a + E_w)}{k_B T}} \right] \right] \exp \left[- \left(\frac{(E_a + E_w)}{k_B T} \right) \right] + \left[1 - \operatorname{erf} \sqrt{\frac{(E_a + E_w)}{k_B T}} \right] \dots (3.II)$$

أي $E_a + E_w < 0$ و $P(K, L) = 1$

لتعريف $SFRP$ لجزئ $C_y H_x$ ، نستعمل احتمال $SPRP(K, L)$ [29]:

يوجد نوعان من احتمالات التفاعل :

1. احتمال التفاعل على السطح وهذا ينقسم الى :

✓ إعادة التركيب γ la recombination :

وهو انتزاع ذرة H من السطح مثل $CH_x - S + H \rightarrow CH_{x+1} + S$ لتشكيل جزئ $\gamma = \tau_H P_\gamma$.

✓ ظاهرة الالتصاق collage s :

وهي ظاهرة يتم فيها ارتباط جزيئات مهدرجة بمواقع فارغة على السطح لتشكيل جذور $s = (1 - \tau_H) P_s$

$$\beta_K = s + \gamma = P_s \tau_0 + P_\gamma \tau_H \quad \text{أي}$$

$$\tau_H = \frac{N_H}{N_0 + N_H} \quad \text{و} \quad \tau_0 = \frac{N_0}{N_0 + N_H}$$

τ_0 : نسبة المواقع الشاغرة . τ_H : نسبة المواقع المحجوزة DB .

N_0 : عدد المواقع الشاغرة فقط - Cu في وحدة السطح .

N_H : عدد المواقع بين $Cu-H$ في وحدة السطح .

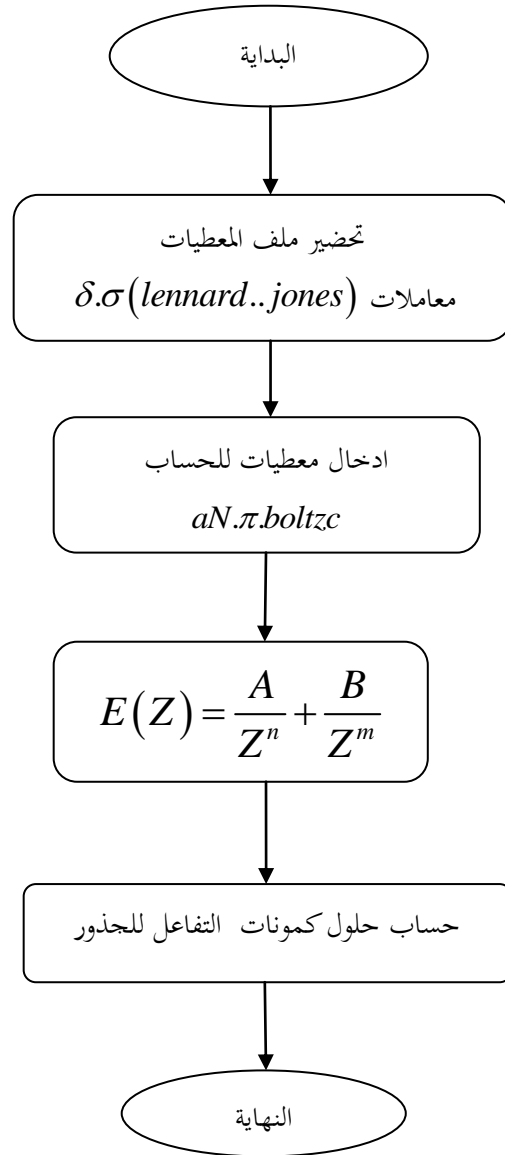
و $\tau_0 + \tau_H = 1$ احتمال التفاعل على السطح β_K لجذور CH_3 (CH_2, CH, H) يعرف بالعلاقة

$$\gamma = P_\gamma \tau_H \quad \text{و} \quad s = P_s \tau_0$$

✓ احتمالية التفاعل على الموقع بالالتصاق P_s

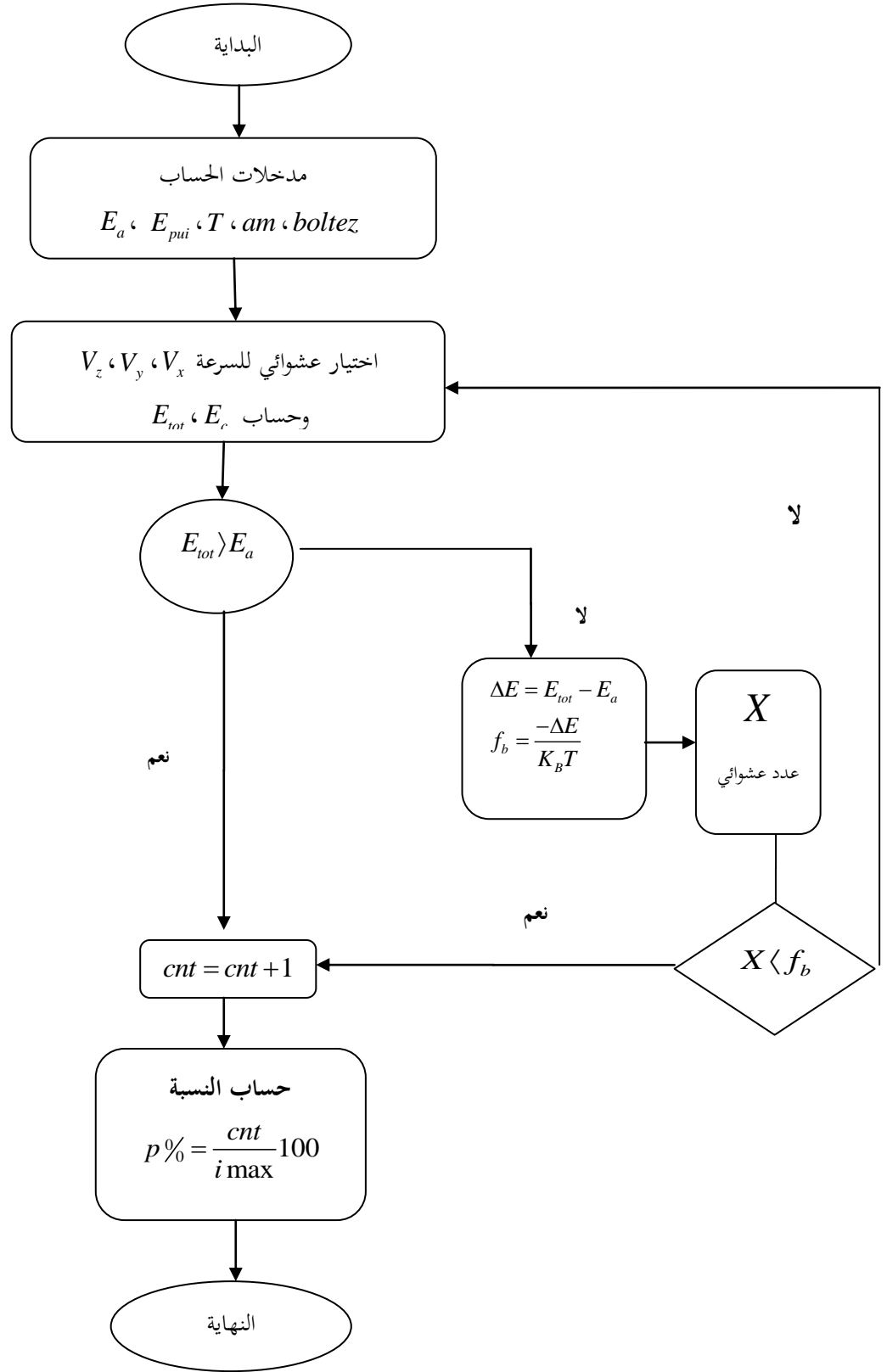
✓ احتمالية التفاعل على الموقع بإعادة التركيب P_γ

II.6. مخطط لحساب كمونات التفاعل للجذور:



يستعمل هذا الكمون لإيجاد طاقة البئر الكموني E_{11} و البعد عن السطح الذي يوافق اقل طاقة z_0 .

7.II. مخطط لحساب نسبة التفاعل على الموقع باستعمال محاكاة مونتني كارلو :



الفصل الثالث:

مناقشة وتحليل النتائج

الفصل III : المناقشة وتحليل النتائج

III.1. المقدمة:

في هذا الفصل، نقدم نتائج حساب احتمال التفاعل على الموقع P_γ و P_s و على السطح s ، γ ، β باستخدام

مونت كارلو و استعمال النموذج النظري خلال ترسيب طبقة الجرافين بطريقة الترسيب الكيميائي للبخار بدعم البلازما

. PECVD

III.2. احتمالات التفاعل للجذر النشط على الموقع خلال توضع الجرافين بطريقة

:PECVD

حساب احتمالات التفاعل على الموقع في حالة الارتباط P_s (Collage) وحالة اعادة التركيب

للجزيئات P_γ (Recombination) حيث $y=0$ أو $y=1$ و x متغيرة .

بين الجدول III.1 قيم طاقات التنشيط لجذور C_yH_x : بين الجدول III.1

بين الجدول III.1 قيم طاقات التنشيط لجذور C_yH_x :

III.1 : قيم طاقات التنشيط للجذور

E_a (eV)	CH_3	CH_2	CH	H
Recombination[30]	0.42	0.42	0.42	0.42
Collage	0.32	0.26	0.31	[27] 0.45

استعمالنا العلاقة الرياضية رقم (2) سابقا في النموذج النظري :

$$P(k, L) = \left[\frac{4}{3\sqrt{\pi}} \left[\sqrt{\frac{(E_a + E_w)}{k_B T}} \right]^3 + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left[\sqrt{\frac{(E_a + E_w)}{k_B T}} \right] \right] \exp \left[- \left(\frac{(E_a + E_w)}{k_B T} \right) \right] + \left[1 - \operatorname{erf} \sqrt{\frac{(E_a + E_w)}{k_B T}} \right]$$

E_a : طاقة التنشيط .

E_w : عمق البئر الكموني .

K_B : ثابت بولتزمان $1.38 \times 10^{-23} J/K$.

T : درجة حرارة المزيج الغازي .

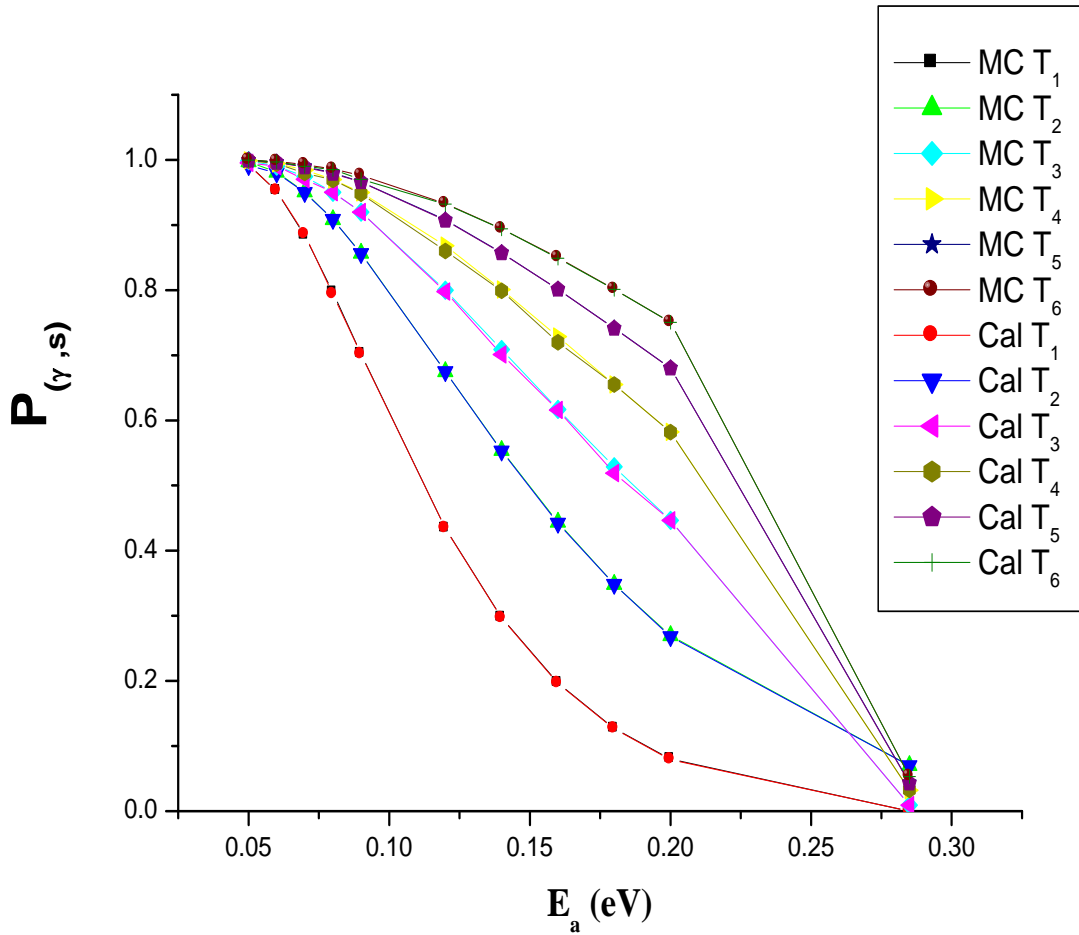
3.III. حساب احتمال التفاعل على الموقع للجذور C_yH_x باستعمال محاكاة مونت كارلو والنموذج النظري :

1.3.III. احتمال التفاعل على الموقع بالنسبة للجذر CH_3 :

باستخدام المعادلة المذكورة سابقا ، يتم الحصول على القيم $P_{s,\gamma}$ باستعمال محاكاة مونت كارلو والنموذج النظري ، في قيم

درجات حرارة T للغاز و بطاقات التنشيط E_a مختلفة . نتائج الحساب موضحة في الشكل 1.III :

MC : Monte carlo , Cal : Calcul



الشكل 1.III : نتائج حساب احتمال التفاعل على الموقع $P_{s,\gamma}$ بالنسبة لجزئ CH_3 بالنموذج النظري و بمحاكاة مونت كارلو

عند درجات الحرارة مختلفة $T_1 = 100K$ و $T_2 = 300K$ و $T_3 = 500K$ و $T_3 = 700K$ و $T_3 = 900K$ و $T_3 = 1100K$

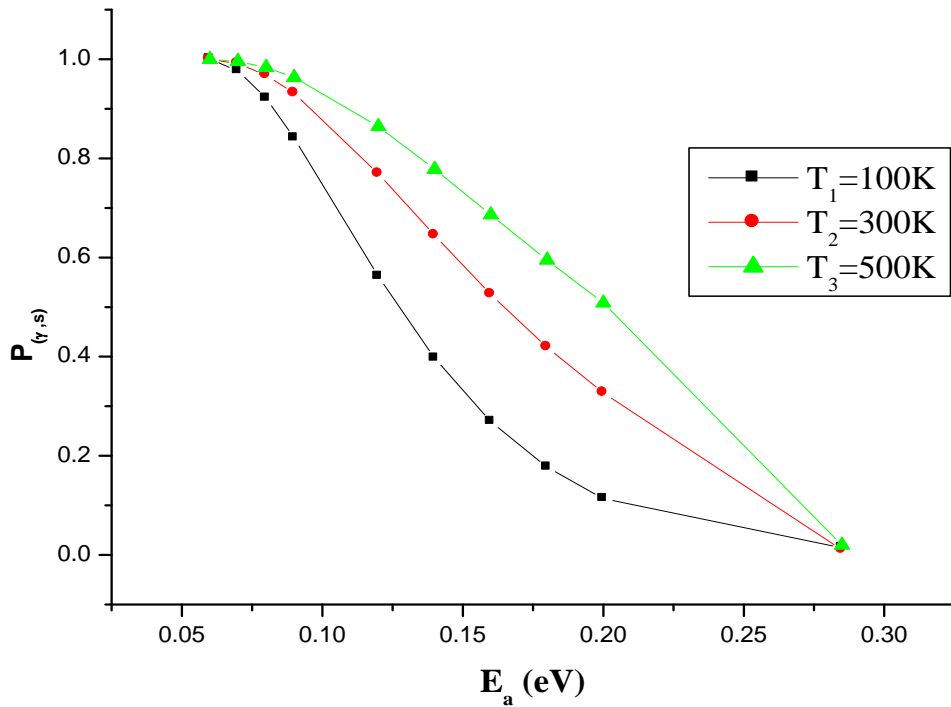
نلاحظ من الشكل III.1 أن:

- ✓ احتمال التفاعل على الموقع $P_{s,\gamma}$ يتغير بين القيمتين $[0,1]$.
 - ✓ عند طاقة تنشيط أقل من $P_{s,\gamma} = 1 \leftarrow 0.05eV$ و عند طاقة التنشيط أكبر من $P_{s,\gamma} = 0 \leftarrow 0.28eV$.
 - ✓ يوجد تطابق تام بين نتائج المحاكاة و نتائج النموذج النظري في درجات الحرارة $T_1, T_2, T_3, T_4, T_5, T_6$.
 - ✓ يوجد تناسب طردي بين درجة الحرارة و احتمال التفاعل على الموقع $P_{s,\gamma}$ أي كلما زادت T زاد $P_{s,\gamma}$.
 - ✓ يوجد تناسب عكسي بين طاقة التنشيط E_a و احتمال التفاعل على الموقع $P_{s,\gamma}$ كما هو مبين في الشكل.
- نظرا لتطابق نتائج الحساب بالمحاكاة والنموذج النظري نقدم نتائج المحاطة فقط بالنسبة للجذور .

III.2.3. احتمال التفاعل على الموقع بالنسبة للجذر CH_2 :

بين الشكل (III.2) حساب احتمال التفاعل $P_{s,\gamma}$ بدلالة طاقة التنشيط في درجات حرارة مختلفة T_1, T_2, T_3 بالنسبة لجزئ

CH_2 باستعمال محاكاة مونتني كارلو



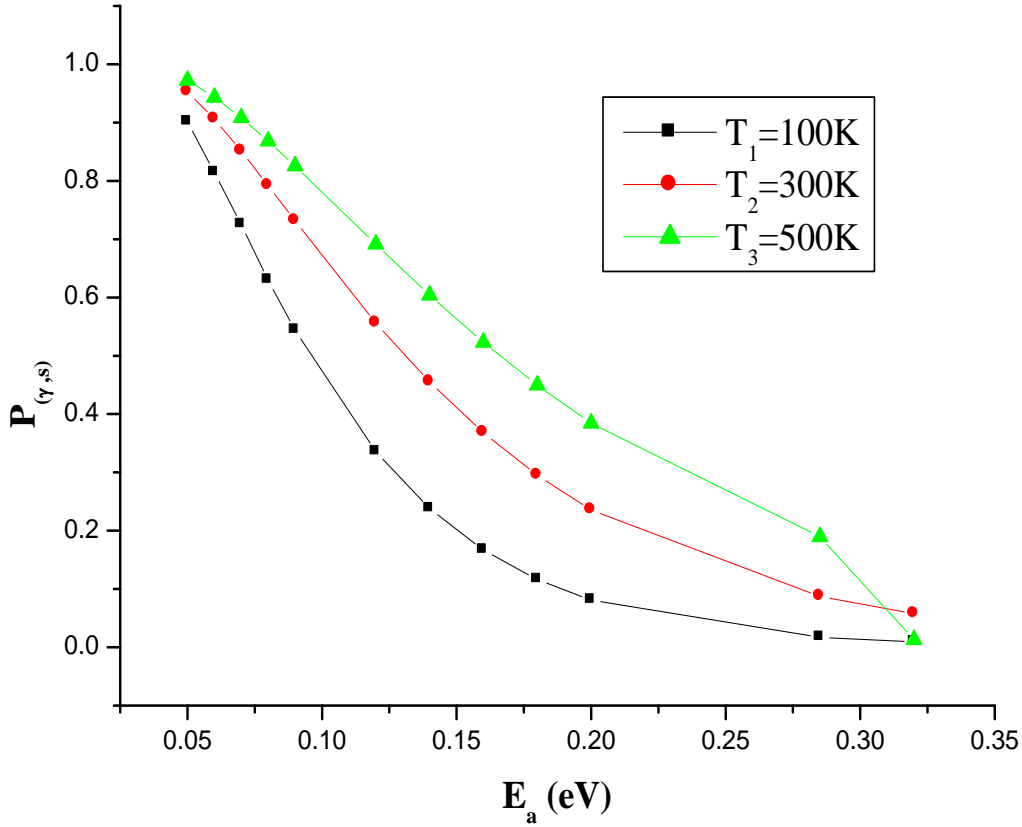
الشكل III.2 : نتائج حساب احتمال التفاعل $P_{s,\gamma}$ بدلالة طاقة التنشيط في درجات حرارة مختلفة T_1, T_2, T_3 بالنسبة لجزئ

CH_2 باستعمال محاكاة مونتني كارلو.

3.3.III. احتمال التفاعل على الموقع بالنسبة للجذر CH :

بين الشكل (3. III) حساب احتمال التفاعل $P_{s,\gamma}$ بدلالة طاقة التنشيط في درجات حرارة مختلفة T_1, T_2, T_3 بالنسبة لجزئ

CH باستعمال محاكاة مونتج كارلو



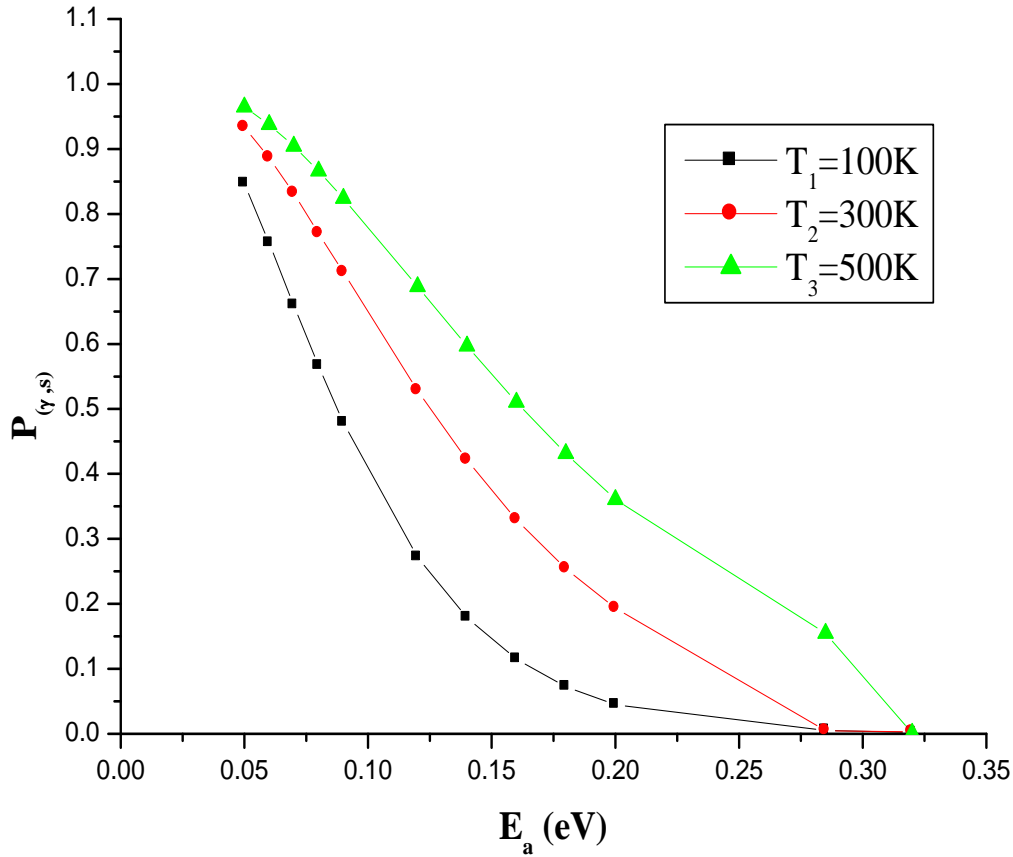
الشكل 3. III: نتائج حساب احتمال التفاعل $P_{s,\gamma}$ بدلالة طاقة التنشيط في درجات حرارة مختلفة T_1, T_2, T_3 بالنسبة لجزئ

CH باستعمال محاكاة مونتج كارلو.

4.2.III. احتمال التفاعل على الموقع بالنسبة للجذر H بالنسبة لطاقة التنشيط :

بين الشكل (4.III.) حساب احتمال التفاعل $P_{s,\gamma}$ بدلالة طاقة التنشيط في درجات حرارة مختلفة T_1, T_2, T_3 بالنسبة لجزئ

H باستعمال المحاكاة.



الشكل 4.III. نتائج حساب احتمال التفاعل $P_{s,\gamma}$ بدلالة طاقة التنشيط في درجات حرارة مختلفة T_1, T_2, T_3 بالنسبة لجزئ H

باستعمال المحاكاة.

بالنسبة للجذر CH_2 يتغير منحنى الاحتمال $P_{s,\gamma}$ بدلالة طاقة التنشيط بطريقة مماثلة للشكل 1.III. وكذلك طاقة التنشيط على

الموقع موجودة في نفس المجال.

بين الشكل. III. 4. : تغير طفيف في مجال طاقة التنشيط للجذر H حيث أنها تتغير بين [0.04–0.34] .

III.4. نتائج الاحتمال على السطح للجذور β, γ, s :

III. 3. 1. قيم احتمال التفاعل في حالة الالتصاق s وفي حالة إعادة التركيب γ واحتمال الاجمالي على السطح β للجذر CH_3 :

بين الجدول III. 2. قيم نتائج حساب احتمالات تفاعل على الموقع P_s, P_γ والتفاعل على السطح β, γ, s بدلالة نسب المواقع المهدرجة.

III. 2. : قيم احتمالات التفاعل على الموقع و على السطح بالنسبة للجذر CH_3

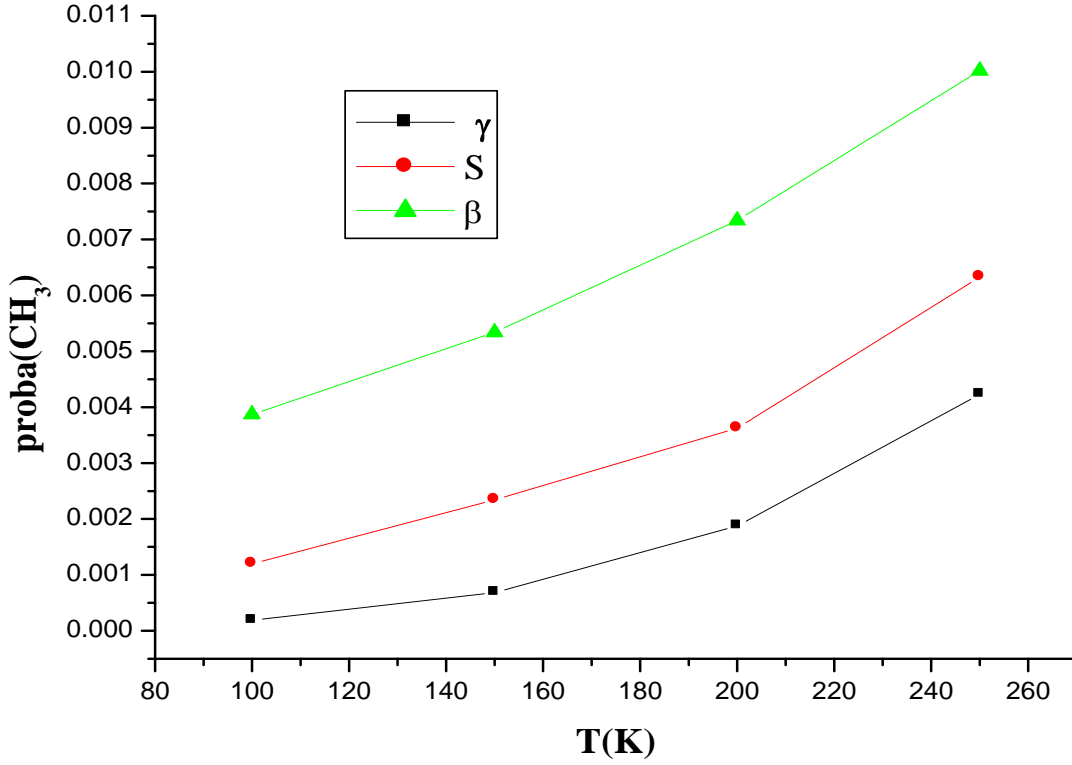
T(K)	100	150	200	250
P_γ	0.00027	0.000903	0.002347	0.004974
P_s	0.00399	0.00937	0.01812	0.03555
$\tau_H \%$	70	75	80	85
γ	0.002673	0.003015	0.003716	0.003694
S	0.001197	0.0023425	0.003624	0.006326
β	0.00387	0.00534	0.00734	0.01002

نلاحظ أن الاحتمال الاجمالي على السطح $\beta(CH_3)$ محصور بين [0.003–0.01] عند درجات الحرارة بين

[100K – 250K] وهذا يتوافق مع الأعمال التالية :

- عام (1997) قام Masaharu Shiratani, all حددت من 0.01–0.02 الى 0.01–0.015 [31]
- عام (1998) قام Jerome Perin ,all بتحديد قيمتها ما بين 0.001 الى 0.01 [32] .
- عام (1999) قام A. Von Keudell, C. Hopt, all بتحديد قيمتها ب 10^{-2} [33] .
- عام (2002) أعاد A. Von Keudell, C. Hopt, all التجربة فكانت قيمتها ما بين 10^{-3} الى 0.014 [34].

بين الشكل (5.III) احتمال التفاعل على السطح لإعادة التركيب γ و الالتصاق s و الاحتمال الاجمالي على السطح β ل CH_3 .



الشكل 5.III. احتمال التفاعل على السطح لإعادة التركيب γ و الالتصاق s و الاحتمال الاجمالي على السطح β ل CH_3 .

بين الشكل 5.III. تزايد في احتمالات التفاعل على السطح β, s, γ بزيادة درجات الحرارة.

ان الاحتمال التفاعل على السطح بالالتصاق s أكبر من احتمال التفاعل على السطح بإعادة التركيب γ .

III . 2.3 . قيم احتمال التفاعل في حالة الالتصاق s وفي حالة إعادة التركيب γ واحتمال الاجمالي على السطح β للجذر CH_2 :

بين الجدول III 3. قيم احتمالات تفاعل على الموقع P_s ، P_γ واحتمالات التفاعل على السطح s, γ, β . كذلك بدلالة نسبة المواقع المهدرجة.

III 3. : قيم احتمالات التفاعل على الموقع و على السطح بالنسبة للجذر CH_2

T(K)	100	150	200	250
P_γ	0.000408	0.001306	0.003215	0.006582
P_s	0.02722	0.0395	0.06363	0.09261
$\tau_H \%$	70	75	80	85
γ	0.0095331	0.007415	0.00678	0.009311
s	0.006366	0.009875	0.01272	0.01389
β	0.0159	0.01729	0.0195	0.0232

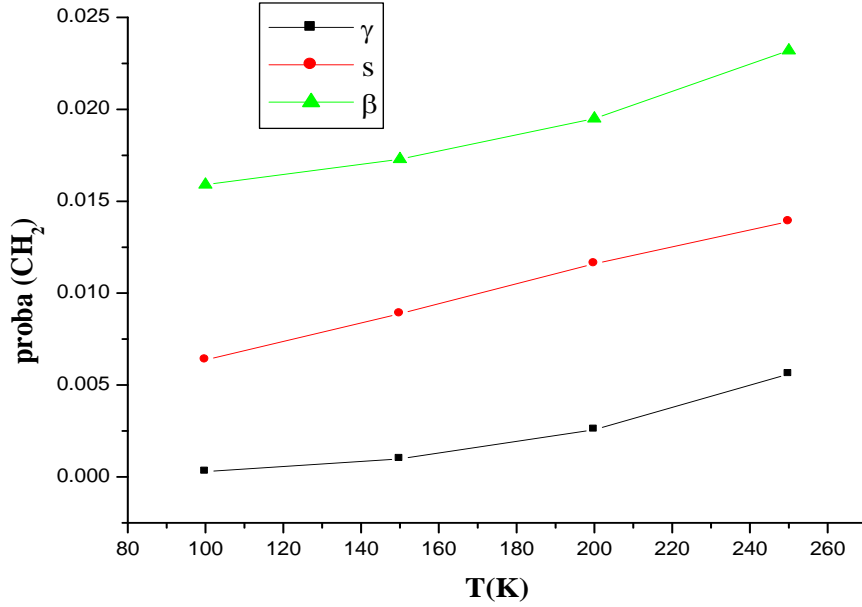
وجد أن احتمال التفاعل على السطح للجذر $\beta(CH_2)$ محصور بين [0.0159–0.0232] عند درجات الحرارة ما بين

[250K–100K] وهذا يتوافق مع عمل [34]A. Von Keudell, C. Hopt, all حيث أن

$$\beta(CH_2) \sim 0.025$$

بين الشكل (6.III) احتمال التفاعل على السطح لإعادة التركيب γ و الالتصاق s و الاحتمال الاجمالي على السطح β ل

$.CH_2$

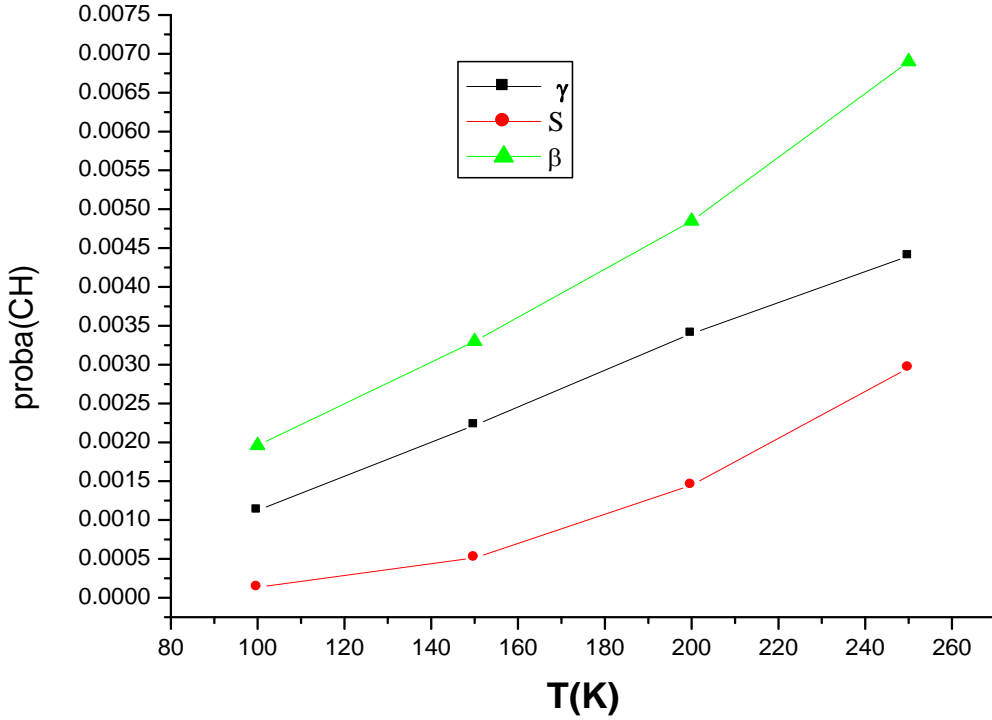


الشكل 6.III. احتمال التفاعل على السطح لإعادة التركيب γ و الالتصاق s و الاحتمال الاجمالي على السطح β للجذر

$.CH_2$

بين الشكل III. 6. تزايد في احتمالات التفاعل على السطح s, γ, β مع تزايد درجات الحرارة.

III . 3.3 . قيم احتمال التفاعل في حالة الالتصاق s وفي حالة إعادة التركيب γ واحتمال الاجمالي على السطح β للجذر CH : بين الشكل (7.III) احتمال التفاعل على السطح لإعادة التركيب γ و الالتصاق s و الاحتمال الاجمالي على السطح β ل CH .



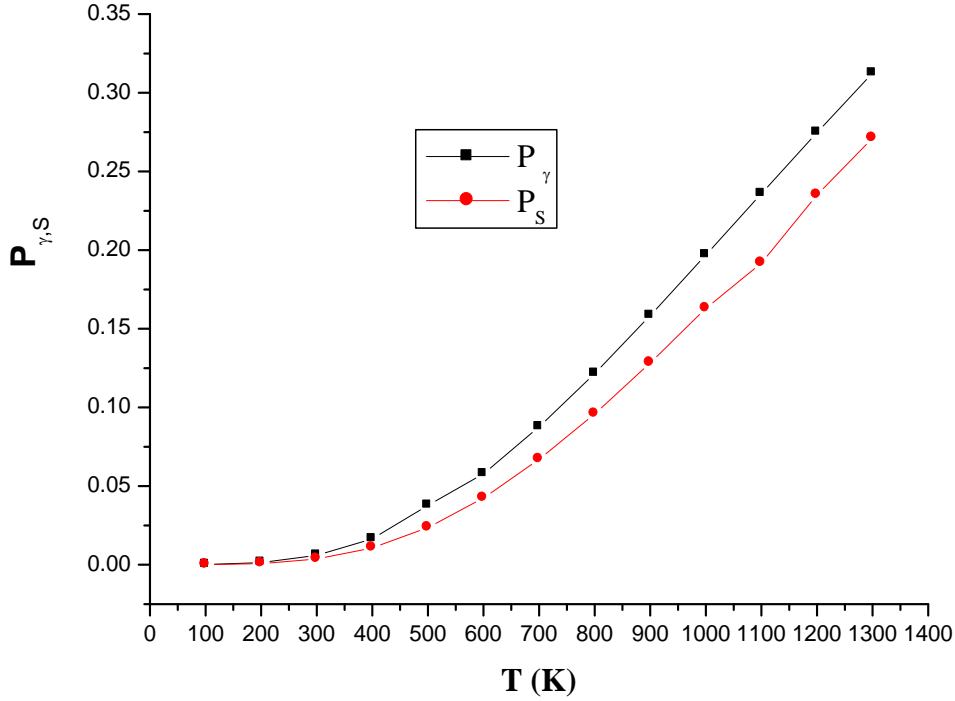
الشكل 7.III. احتمال التفاعل على السطح لإعادة التركيب γ و الالتصاق s و الاحتمال الاجمالي على السطح β

للجذر CH .

III. 4.3. قيم احتمال التفاعل بالنسبة للجذر H :

III. 1.4.3. احتمال التفاعل على الموقع $P_{s,\gamma}$ للجذر H بالنسبة لدرجة الحرارة:

بين الشكل (III. 8) احتمال التفاعل على الموقع بالتصاق P_s و بإعادة التركيب P_γ ل H



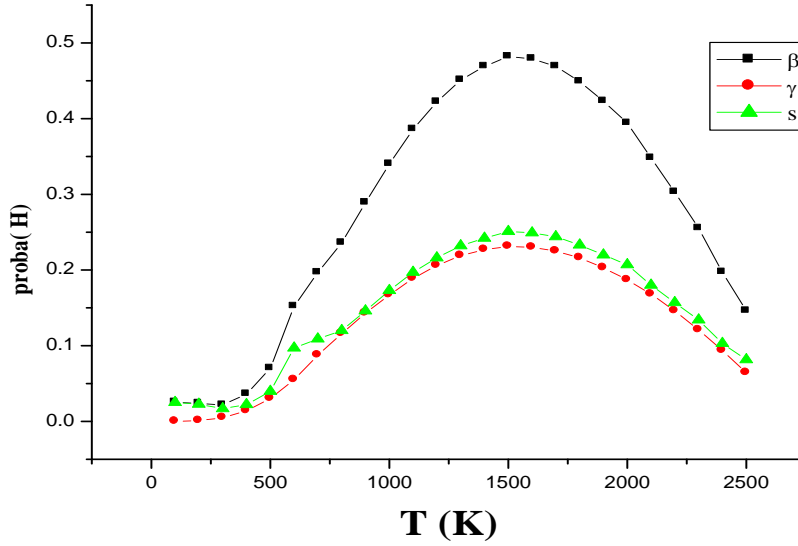
الشكل III. 8. احتمال التفاعل على الموقع بالتصاق P_s و بإعادة التركيب P_γ ل H .

بين الشكل III. 8. تزايد في احتمال التفاعل على الموقع $P_{s,\gamma}$

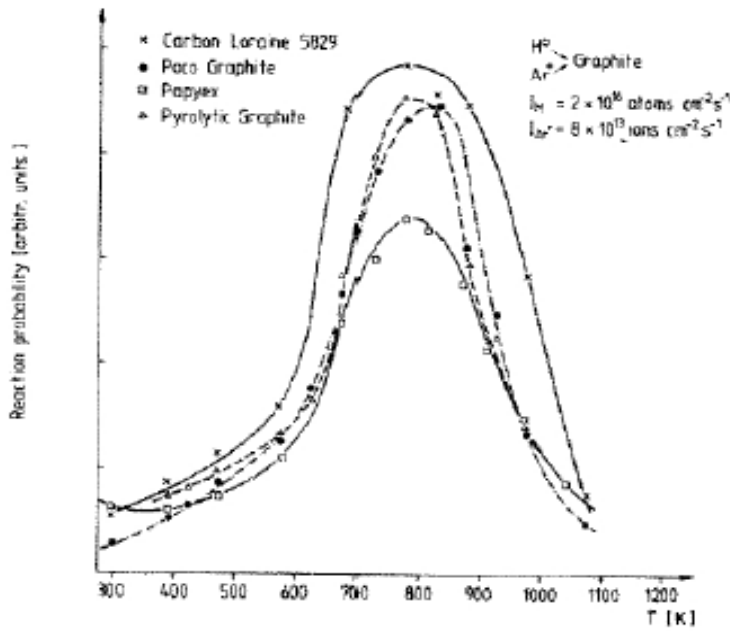
• نلاحظ أن احتمال التفاعل على الموقع P_γ أكبر من P_s .

III. 2.3.3. احتمال التفاعل على السطح β, γ, s للجذر H :

بين الشكل (III. 9). احتمال التفاعل على السطح لإعادة التركيب γ و الالتصاق s و الاحتمال الاجمالي على السطح β للجذر H .



الشكل III. 9. احتمال التفاعل على السطح لإعادة التركيب γ و الالتصاق s و الاحتمال الاجمالي على السطح β للجذر H .



الشكل III.10. احتمالات التفاعل للجذر H درجات الحرارة مختلفة [26].

بين الشكل III. 9. احتمالات التفاعل على السطح بالنسبة للجذر H حيث نلاحظ تزايد للاحتمالات β, γ, s في درجات حرارة $K [1500-0]$ الى القيمة العظمى ومن ثمة تناقص لها.

نلاحظ تماثل في شكل المنحني بين الشكل III. 9. و الشكل III. 10 أي توافق في تغير الاحتمال بين عملنا و العمل في المرجع 26 .

الخلاصة العامة

الخلاصة العامة

الجرافين هو مادة جديدة بخصائص خارقة للعادة تم عزله من الجرافيت عام 2004م ، وقد اعتبر المادة المدهشة في القرن 21 م وكان محط اهتمام الكثير من العلماء نتيجة خصائصه وقدراته الفيزيائية ومستقبله الواعد ومازال إلى حد الان قيد الدراسة في هذه المذكرة درسنا توضع طبقة رقيقة من الجرافين بطريقة PECVD باستعمال الخليط الغازي (CH_4 / H_2) ، في هذا العمل نستعمل محاكاة مونتني كارلو التي تقوم على الاختيار العشوائي للهيئات ثم قبول أو رفض بعض هذه الهيئات في شروط فيزيائية معينة. الجذور النشطة المساهمة في نمو طبقة الجرافين و المتواجدة في البلازما هي CH_4, CH_3, CH, H . حسبنا احتمالات التفاعل على الموقع P_s و P_γ و احتمالات التفاعل على السطح β, γ, s لكل جذر نشط ، كانت نتيجة حساب الاحتمال الاجمالي على السطح β للجذر CH_3 محصورة بين $[0.003-0.01]$ في درجات الحرارة $[250K-100K]$ وأبدت هذه النتائج توافق مع أعمال سابقا [31]. [32]. [33]. [34] . وكذا بالنسبة للجذر CH_2 كانت النتائج متوافقة مع [34].

يمكننا إجراء دراسات أكثر تعمقا لحساب احتمالات التفاعل خلال توضع طبقات جديدة من خلايط غازية أخرى ، ويمكن دراسة مختلف التأثيرات الفيزيائية والكيميائية خلال توضع الجرافين .

المراجع

- [1] A. Grunenwald; "Dépôt et caractérisation de couche minces diélectrique poreuses porosité ordonnée obtenues par voies sol-gel et plasma" thèse de doctorat ; l'Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Montpellier (2011).
- [2] ميموني إيمان، "المساهمة في دراسة الطبقات الرقيقة للخلايا الشمسية a-Si:H و a-Si المرسبة بتقنية PECVD" مذكرة ماستر جامعة ورقلة (2016).
- [3] بزيو حليلة، "مساهمة في دراسة توضع الجرافين بتقنية الترسيب الكيميائي CVD" مذكرة ماستر جامعة ورقلة (2015).
- [4] N.Khelef ; "Etude de propriétés thermiques en phase gazeuse lors de la déposition d'une couche mince par les procédés HWCVD" ; thèse de master ; Université Kasdi Merbah ; (2015).
- [5] S. Hadjadj ; "calcul par la method Monte Carlo des probabilités de la reactivité à la surface lors de la déposition d'une couche mince a-Si : H par le procédé PECVD " ; Thèse Master , Université Kasdi Marbah Ouagla (2015).
- [6] O.Babahani ; "Simulation numérique par la méthode de Monte Carlo de la déposition de couche minces par procédés CVD " ; Thèse de Doctorat ; Université Kasdi Merbah ; (2013).
- [7] M. I. Katsnelson ; "Graphene : carbon in todimensione" ; Materialstoday ; Vol.10 ; N.12 ; Jan-Fer (2007).
- [8] A.Tejada, A.Talab-Ibrahimi, C.Berger ; "Les propriétés du Graphène en mille-feuille" ; Refles de la physique, EDP Sciences ; pp : 84 ; (2013).
- [9] M. Olivier ; "Développement de la croissance de graphène par CVD sur cobalt, analyses morphologique et structurale " ; thèse de doctorat de l'université Paris-Saclay, préparée au NIMBECEA-CNRS UMR 3685 (2015).
- [10] A. Allard, "Etude ab-initio des phonons du Graphène sur substrat métalliques", Université Sciences et Technologies Lille, December (2011).
- [11] S. Bharech , R. Kunar ; " A Review on the properties and Application of Graphene " ; journal of Material Science and Mechanical Engineering ; No.10 ; Vol.2 ; pp :70-73 (2015).
- [12] K. Kin, J. Young, T. Kim, S. Hocho, H. Jong chung ; "A role for grapheme in silicon-based semiconductor devices" Review insight ; Vol. 479 ; (2011).
- [13] M. Elachaby ; "Nanocomposites Graphène-Polymé Thermoplastique : Fabarication et Etude des Propriétés Structurales, Thermiques Rhéologiques et Mécaniques" ; Thèse de doctorat ; Université Mohammed V-A

- [14] J.Azevedo; "Assemblage controle de graphéne et de nanotubes de carbone par transfert de film de tensioactifs pour le photovoltaïque " ; Thèse de Doctorat ; Université de Paris –Sud(2013).
- [15] Morgan A.Brown, Michael S.Crosser , Mattew R.Leyden ,Yabing Qi, and Ethan D.Minot ;"Measurement of high carrier mobility in graphene in an aqueous electrolyte environment Appl" ;phys.Lett.109, 09310(2016).
- [16] R. R. Nair, P.Blak ,A.N .Grigorenka, K.S.Novoselov , T.J.Peres , A.K.Geim; "Fine Structure Constant Defines Visual Transparency of Graphene" Science; Vol.320;(2008).
- [17] A. H. Castro Neto, F. Guinea,N.M.R.Peres, K. S.Nevelov and A. K. Geim ;" The electronic properties of graphene " ; Reviews of mode physics ; Vol.81 ;(2009).
- [18] T. Kuilla, S.Bhadra , D.Yao, N.Hoon Kin, S.Bose ,J.Hee ;" Recent advances in graphéne based polymer composites " ; Progress in polymer ;pp1350-1375(2010).
- [19] A. Balandin, S. Ghosh, W.Bao, I.Calzo, D.Teweldebrhn, F.Miao, C. Ninglair; "Superior Thermal Conductivity of Single-Layer Graphene " Nano Letter ; Vol.8; No.3;pp:902-907 (2008).
- [20] C. Mattevi , Hokwonkin , M. Chhowall ;"Arevien of Chemical Vapor Déposition of Graphene on copper " ; The Royel Society of Chemical ; Vol.21 ;pp:3324-3334(2011).
- [21] <https://www.youtube.com/watch?v=F8NxvkwkhiI>.
- [22] A. K. Geim, K. S. Novoselov ; "The rise of graphene"; Nature Materaile; Vol.6; pp:183-191; (2007).
- [23] M. Czernaik-Reczulaska, A. Niedzielska, A. Jedrzejak ; "Graphene as a material for solar cells application" ;Material Science; Vol.15; No.4(46) ;(2015).
- [24] C. Tanugi, David, Grossman, C. Jeffrey; "Water Dasalination across Nanoporous Graphene " ; Nan Letters ; No.7 ; Vol.12 ;pp 3602-3608 (2012).
- [25] Yang He, all; "Influence of reaction parameters on synthesis of high-quality Single-Layer grapheme on Cu using chemical vapor deposition " ; Chinese Physical Society and IOP Publishing Ltd; Vol.23; pp: 096803 ;(2014).
- [26] A. Eradi; "Etude de L'interaction de L'hyrogéne avec les couches minces de carbon amorphe hydrogen (a-C : H) " ; thèse de doctorat ; Université Toulouse (2010).
- [27] R. Munoz, C. Gomez-Aleixandre; "Review of CVD Syntheses of Graphene " ; Journal Material Chemistry; Vol .9; pp: 297-322; (2013).

المراجع

- [28] C. Mattevi, H. Kim, M. Chhouralla; "A review of Chemical Vapour Deposition of Graphene on Copper"; *Journal of Material Chemistry*; Vol.2; pp :3324-3334 ;(2010).
- [29] O. Babahani, F. Khelfaoui, M. T. Meftah; "Analytical calculation of site and surface reaction probabilities of SiH_x radicals in PECVD process"; *the European physical Journal Applied Physics*; (2013).
- [30] E. J. Dawnhashski, D. Srivastava, B. J. Garrison; "Growth of diamond films on a diamond $\{001\}(2 \times 1): H$ Surface by time dependent Monte Carlo Simulation"; *The Journal of Chemical Physics*; Vol.104; No.15; (1996).
- [31] M. Shiratani; "Surface Reaction Kinetics of CH_3 in CH_4 RF Discharge Studied by Time-Resolved Threshold Ionization Mass Spectrometry"; *Japanes Journal of Applied Physics*; Vol.36; N.7B (1997).
- [32] J. Perrin, all; "Surface reaction probabilities and Kinetics of H, SiH_3 , Si_2H_5 , CH_3 , and CH_4 discharge"; *American Vacuum Society*; Vol.6; pp:278-289 ;(1998).
- [33] A. Von Keudell, C. Hopf, T. Schway-Selinger, W. Jacob; "Surface loss probability of hydrocarbon radicals on amorphous hydrogenated carbon film surface: Consequences for the formation of re-deposited Layers in fusion experiments" *Nuclear Fusion*; Vol.39; No.10; pp: 1451-1462, (1999).
- [34] A. Von Keudell, M. Meier, C. Hopf; "Growth mechanism of amorphous Hydrogenated carbon"; *"Diamond and Related Materials"*; Vol.11; pp: 969-975; (2002).

المخلص :

من أجل توضع طبقة رقيقة من الجرافين بواسطة الترسيب الكيميائي للبخار بدعم البلازما PECVD، استعملنا البرمجة العددية بلغة الفورترن قمنا باستعمال محاكاة مونت كارلو وكمون (9.3) لحساب احتمالات التفاعل على الموقع P_s و P_γ و احتمالات التفاعل على السطح وهي معامل الالتصاق s و معامل اعادة التركيب γ و المعامل الاجمالي β لمختلف الجذور (CH_4, CH_3, CH, H) من أجل درجات حرارة مختلفة للخليط الغازي (CH_4 / H_2) وكانت النتائج متوافقة مع أعمال أخرى .

الكلمات المفتاحية : الجرافين - PECVD - احتمال التفاعل على السطح - طاقة التنشيط أو التحفيز للتفاعل - محاكاة مونت كارلو .

Résume :

Pour la déposition d'une couche mince de Garaphène par le procédé chimique en phase Vapeur assisté par plasma (PECVD) nous avons proposé un calcul numérique en utilisant le langage fortran, la Simulation de Monte Carlo et le potentiel (3.9). Nous avons calculé les probabilités de réactivité sur site P_γ et P_s et les probabilités de réactivité à la surface par de collage s , la probabilité de recombinaison γ et la probabilité β pour les radicaux (CH_4, CH_3, CH, H) par des différentes températures de mélange gazeur (CH_4 / H_2), Nos résultats sont en bonne accord avec d'autres travaux.

Mots de clef : Garaphène, PECVD, Probabilité de réactivité à la surface, Energie d'activation, Simulation de Monte Carlo.

Summary :

For the déposition of a thin films of Garaphene by the plasma Enhanced Chemical Vapor assisted by (PECVD), We proposed a numerical calculation using the Fortran language, Monte Carlo Simulation and the potential (3.9), We calculated site réaction probabilities P_γ , P_s . We calculated also the Sticking probability s , recombination probability γ and surface reaction probability β for the radicals (CH_4, CH_3, CH, H) at different temperatures of gas mixture (CH_4 / H_2). Our results are in good agreement with other works.

Key work: Garaphene, PECVD, Probability of surface reactivity, Activation Energy, Simulation de Monte Carlo.